BUDAPESTI MŰSZAKI
ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

VEGYÉSZMÉRNÖKI
ÉS BIOMÉRNÖKI
KAR

2025.

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

A szekcióülések kezdete:

2025. november 19. 8:30

Eredményhirdetés:

2025. november 19. 18:00

Ch. C14. terem

A BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán rendezett
2025. évi Tudományos Diákköri Konferenciát
támogatták:

BME Rektori Hivatal
BME VBK Dékánja és a Varga József Alapítvány
BME Egyetemi Hallgatói Képviselet
Ceva-Phylaxia Zrt.
Dr. Pungor Ernő családja
Egis Gyógyszergyár Zrt.
EUROAPI Hungary Kft.
MOL Nyrt.
LabCup Ltd.
Pro Progressio Alapítvány
Richter Gedeon Nyrt.
Robert Bosch Kft.
Magyar Kémikusok Egyesülete

BME VEGY-ÉRTÉK Tehetségpont

Az NTP-HHTDK-25-0033 számú pályázat támogatásával megvalósuló program.

Időpont	Analitikai és számításos kémia szekció Ch. 308.	Anyagtudomány és polimerkémia szekció K. 134.	Biokémia, biotechnológia és élelmiszer-tudomány szekció Ch. 201.	Kémiai technológia és vegyipari műveletek szekció Ch. A10.	Szerves kémia szekció Ch. C14.	Időpont
8:30–8:45	**Györök Ákos**	**Yu Lang Richard**	**Szeip Judit**	**Nádasdi Zsófia**	**Bese Cintia**	8:30–8:45
8:45–9:00	**Virág Bogdán**	**Kissová Szabina**	**Iványi Adrienn Emese**	**Takács Orsolya**	**Batizi Benedek**	8:45–9:00
9:00–9:15	**Horváth Virág Nikolett**	**Florez Gonzalez Janny Franscesca**	**Vigh Fanni Beatrix**	**Palló Barnabás**	**Raduly Amália**	9:00–9:15
9:15–9:30	**Németh Emese**	**Szlovicsák Zita Margit**	**Kovács Luca**	**Luterán Gergő**	**Győrfi Sára**	9:15–9:30
9:30–9:45	**Rokonay Szonja**	**Kovács Kinga**	**Lois Izabella, Roza Petra**	**Bodrogi Éva**	**Nguyen Van Nghiem**	9:30–9:45
9:45–10:00	**SZÜNET**					9:45–10:00
10:00–10:15	**Kasoly Csenge Anna**	**Király Anna**	**Golács Zita Réka**	**Gerő Viktória**	**Hahn Vencel Károly**	10:00–10:15
10:15–10:30	**Csipkó Hanga Zoé**	**Lengyel Lívia**	**Kovács Fanni Virág**	**Somogyvári Erik**	**Burkódi Mikes**	10:15–10:30
10:30–10:45	**Szántai Lóránt István**	**Tóth Richárd Ferdinánd**	**Háry Laura**	**Orbán Kristóf, Pál Dóra Nikolett**	**Szloboda Kristóf**	10:30–10:45
10:45–11:00	**Török Csongor**	**Kurucz Noémi**	**Bánrévi Zoltán**	**Kiss Bendegúz Barnabás**	**Papp Márton**	10:455–11:00
11:00–11:15	**Horváth Júlia Boglárka**		**Motuz Benjámin**	**Kerekes Bálint**	**Lam Thi Da Thao**	11:00–11:15
11:15–11:30	**SZÜNET**					11:15–11:30
11:30–11:45	**Veres Milán**		**Budai Anna Brigitta**	**Vasas Ádáma, Vigh Sára, Imre Veronika**	**Kovács Márton**	11:30–11:45
11:45–12:00	**Szegedi Dórka**		**Juhász András János**	**Gémes Gergő**	**Ferenczi Ákos**	11:45–12:00
12:00–12:15			**Nyerki Botond**		**Palotai Gitta Dóra**	12:00–12:15
12:15–12:30			**Sánta Benedek, Frei Márton**		**Répási Gergely Balázs**	12:15–12:30

Elnök: **Dr. Nyulászi László** egyetemi tanár, az MTA rendes tagja
Titkár: **Mátyási Judit** doktorváromány os
Koordinátorok: **Dr. Horváth Viola** egyetemi docens
Dr. Oláh Julianna habil. egyetemi docens
Külső tag: **Dr. Keresztes Zsófia** kutatócsoport-vezető, HUN-REN TTK AKI Funkcionális Határfelületek Kutatócsoport

Helyszín: **Ch. 308.**

8:30 Györök Ákos
Fluoreszcens GFP-kromofórok fotofizikai tulajdonságainak előrejelzése gépi tanulással
Témavezetők: Dr. Kovács Ervin kémia osztályvezető-helyettes
BrainVisionCenter Kft.
Dr. Pavel Sidorov egyetemi docens
Hokkaido University ICReDD

8:45 Virág Bogdán
DFT kontra TD-DFT: Melyikkel követünk el nagyobb hibát foszfortartalmú fotoiniciátor molekulák UV–Vis-spektrumainak szimulálásakor?
Témavezető: Dr. Benkő Zoltán egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

9:00 Horváth Virág Nikolett
Komplex analitikai módszerfejlesztés extracelluláris vezikulák proteomikai és glikoproteomikai vizsgálatára
Témavezetők: Dr. Turiák Lilla tudományos főmunkatárs
HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport
Balbisi Mirjam tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport

9:15 Németh Emese
3,3-Diszubsztituált oxindolok komplexálásának vizsgálata ciklodextrinekkel
Témavezető: Dr. Bálint Erika egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:30 Rokonay Szonja
Felületi akusztikus hullámokkal a szívizomkárosodás nyomában: pontos időpont és súlyosság egyetlen bioszenzorral
Témavezető: Dr. Simon László Ferenc egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

9:45 Szünet

10:00 Kasoly Csenge Anna
Fluoreszcens biomolekulát tartalmazó tabletták hatóanyag-tartalmának vizsgálata UV-képalkotással
Témavezető: Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Csipkó Hanga Zoé
Foszfortartalmú policiklusos aromás szénhidrogének optikai tulajdonságainak kvantumkémiai vizsgálata
Témavezetők: Dr. Benkő Zoltán egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Fekete Csilla PhD-hallgató
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:30 Szántai Lóránt István
Karboránkapcsolt foszfor-heterociklusok aromásságának vizsgálata
Témavezető: Dr. Kelemen Zsolt egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:45 Török Csongor
REIMS- és FT–IR-technika alkalmazása patológiai metszeteken
Témavezető: Dr. Kontsek Endre tudományos munkatárs
SE Patológiai Igazságügyi és Biztosítási Orvostani Intézet

11:00 Horváth Júlia Boglárka
Egy foszfinin-borán Lewis-pár és víz reakciójának kvantumkémiai feltérképezése
Témavezető: Dr. Benkő Zoltán egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Horváth Ádám PhD-hallgató
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

11:15 Szünet

11:30 Veres Milán
Nagy kétfoton-keresztmetszetű feszültségszenzor szintézise és alkalmazása a membránpotenciál követésére
Témavezető: Dr. Cseri Levente senior vegyész
BrainVisionCenter Nonprofit Kft.
Dr. Kupai József habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:45 Szegedi Dorka
Enantiomerszűrés rezolválószerekkel kovalensen módosított mikrotálcákon
Témavezető: Dr. Golcs Ádám egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Elnök: **Dr. Kubinyi Miklós** Professor Emeritus
Titkár: **Lőrincz Balázs** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Farkas Attila** tudományos munkatárs
Dr. Móczó János egyetemi docens
Dr. Renkeczné Dr. Tátraaljai Dóra egyetemi adjunktus
Külső tag: **Dr. Marosfői Béla Botond** csoportvezető, FETI Kft.

Helyszín: **K. 134.**

8:30 Yu Lang Richard
Fotokatalizátor-nanoszemcsék kapszulázása tanninsavval adalékolt kitozán-bevonatokban
Témavezető: Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

8:45 Kissová Szabina
Lángálló és lebomló: Politejsav kompozithabok fejlesztése a fenntartható építőipar számára
Témavezető: Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:00 Florez Gonzalez Janny Franscesca
Luminescent Spinel Nanostructures Embedded in Silica Sol-Gel Silica Coatings for Photonic and Anti-Counterfeiting Applications
Témavezető: Dr. Nagyné Dr. Albert Emőke egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Rudolf M. Mátyás PhD-hallgató
HUN-REN Wigner FKK SZOI Elméleti Szilárdtestfizika Osztály

9:15 Szlovicsák Zita Margit
Nanokristályos cellulóz-lignin filmek
Témavezető: Dr. Koczkáné Dr. Csiszár Emília egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

9:30 Kovács Kinga
Szelektív fényáteresztésű és víztaszító vékonyréteg-rendszerek transzparens és nem transzparens hordozókon
Témavezető: Dr. Nagyné Dr. Albert Emőke egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

9:45 Szünet

10:00 Király Anna
Vanádium-oxid alapú vezetőképességi gázérzékelő
Témavezető: Dr. Dücső Csaba tudományos főmunkatárs
HUN-REN EK MFA Mikrotechnológiai Laboratórium

10:15 Lengyel Lívia
Égésgátló adalékok hatása a politejsav komposztálhatóságára
Témavezető: Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:30 Tóth Richárd Ferdinánd
Folyamatos nedves granulálás külső granuláló folyadék hozzáadása nélkül
Témavezető: Dr. Szabó Edina tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék,

10:45 Kurucz Noémi
Polikaprolakton és nem szteroid gyulladáscsökkentők olvadási viselkedésének vizsgálata nagynyomású szén-dioxid közegben
Témavezető: Dr. Kőrösi Márton egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Elnök: **Dr. Pécs Miklós** ny. egyetemi docens
Titkár: **Emődi Nikolett** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Deák Veronika** egyetemi adjunktus
Dr. Gergely Szilveszter egyetemi docens
Külső tag: **Dr. Harkai Ákos** egyetemi tanársegéd, SE

Helyszín: **Ch. 201.**

8:30 Szeip Judit
Probiotikus baktérium túlélésének javítása kakaópor-alapú granulátumban
Témavezetők: Dr. Szabó Edina tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Hirsch Edit tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:45 Iványi Adrienn Emese
Cupriavidus fajok poli(hidroxibutirát) termelésének vizsgálata hőmérséklet függvényében
Témavezető: Dr. Németh Áron egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

9:00 Vigh Fanni Beatrix
A dUTPáz enzim shRNS-alapú csendesítésének és funkcionális hatásainak vizsgálata humán sejtvonalon
Témavezető: Dr. Vértessy G. Beáta egyetemi tanár, az MTA levelező tagja
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

9:15 Kovács Luca
Hazai szabadtermesztésű cirokfajták változékonysága
Témavezető: Dr. Jaksics Edina egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Juhászné Dr. Szentmiklóssy Marietta Klaudia egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens, tanszékvezető
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

9:30 Lois Izabella, Roza Petra
Timidilát-szintáz-gátlók hatására indukált citozindezamináció vizsgálata vastagbélrák sejtvonalon
Témavezető: Dr. Békési Angéla egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
HUN-REN TTK EI Genom Metabolizmus Kutatócsoport

9:45 Szünet

10:00 Golács Zita Réka
A dUTPáz szerepének vizsgálata a centroszóma dinamikában
Témavezető: Dr. Vértessy G. Beáta egyetemi tanár, az MTA levelező tagja
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

10:15 Kovács Fanni Virág
Szárazúti borsófehérje és -keményítő frakciók átfogó jellemzése, termékfejlesztés lehetősége
Témavezető: Dr. Jaksics Edina egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens, tanszékvezető
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

10:30 Háry Laura
A *Cupriavidus basiliensis* biopolimer termelésének vizsgálata
Témavezető: Dr. Németh Áron egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

10:45 Bánrévi Zoltán
Új potenciális kovalens ortosztérikus SHP2-inhibitorok szintézise és vizsgálata
Témavezető: Dr. Ábrányi-Balogh Péter c. egyetemi docens, tudományos főmunkatárs
HUN-REN TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport
Csorba Noémi PhD-hallgató
HUN-REN TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

11:00 Motuz Benjámin
Várhatóan antiproliferatív hatású vindolin- és krizinszármazékok előállítása és vizsgálata
Témavezető: Dr. Keglevich Péter egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:15 Szünet

11:30 Budai Anna Brigitta
Kritikus nyersanyagok biológiai kioldása görög vörösiszapból
Témavezető: Dr. Feigl Viktória egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

11:45 Juhász András János
A dUTPáz eukarióta sejten belüli kölcsönhatásainak kimutatása
Témavezető: Dr. Vértessy G. Beáta egyetemi tanár, az MTA levelező tagja
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

12:00 Nyerki Botond
Gyapjú mint lehetőség olajszennyezett vizek tisztítására
Témavezető: Barocsai Zoltán tanár
Szekszárdi I. Béla Gimnázium

12:15 Sánta Benedek, Frei Márton
Vízvisszatartás- és talajerózió-csökkentés talajjavító anyagokkal
Témavezető: Barocsai Zoltán tanár
Szekszárdi I. Béla Gimnázium

Elnök: **Dr. Marosi György** Professor Emeritus. az MTA levelező tagja
Titkár: **Árvai Csaba** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Szolnoki Beáta** egyetemi docens
Dr. Mihalovits Máté egyetemi adjunktus
Külső tag: **Dr. Nagy Bence** Olajterv Zrt., Technológia, Engedélyezés és EBK szakágvezető

Helyszín: **Ch. A10.**

8:30 Nádasdi Zsófia
Ciklodextrinnel funkcionalizált mikrotálcák enantiomerszűrési eljárásokhoz
Témavezető: Dr. Golcs Ádám egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:45 Takács Orsolya
Digitális ikerpár a gyógyszeripari fluid granulálásban: tudomány- és mesterséges intelligencia-alapú modellezési módszerek összehasonlítása
Témavezető: Dr. Nagy Brigitta tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:00 Palló Barnabás
Képelemzés alapú szoftverfejlesztés hatóanyagok gócképződési folyamatának vizsgálatára
Témavezető: Dr. Pataki Hajnalka egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:15 Luterán Gergő
Laboratóriumi méretű PGSS-berendezés fejlesztése poli(etilénglikol)–ibuprofen modellrendszer segítségével
Témavezető: Kőrösi Márton egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

9:30 Bodrogi Éva
Módszerfejlesztés amidkötések kisléptékű, automatizálható szintézisére
Témavezető: Dr. Havasi Dávid egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

9:45 Szünet

10:00 Gerő Viktória
Triazolilfoszforamidátok és -foszfinamidok áramlásos kémiai szintézisének fejlesztése
Témavezető: Dr. Bálint Erika egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Somogyvári Erik
Háromkomponensű elegyek elválasztása desztillációs eljárásokkal: fejlesztési lehetőségek hőszivattyú alkalmazásával
Témavezető: Dr. Tóth András József egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

10:30 Orbán Kristóf, Pál Dóra Nikolett
Kétlépéses one-pot szintézis pipettázórobottal való automatizálásának vizsgálata
Témavezető: Dr. Havasi Dávid egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

10:45 Kiss Bendegúz Barnabás
Hibrid modellezés adaptív mesterséges neuronhálókkal: precizitás megőrzése számítási költségcsökkentés mellett
Témavezető: Dr. Szilágyi Botond egyetemi docens
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

11:00 Kerekes Bálint
Poliuretán gyanta félfolyamatos hidrolízise szubkritikus közegben
Témavezető: Dr. Székely Edit egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

11:15 Szünet

11:30 Vasas Ádám, Vigh Sára, Imre Veronika
Sonogashira-kapcsolás automatizálási lehetőségének vizsgálata pipettázórobottal
Témavezető: Dr. Havasi Dávid egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

11:45 Gémes Gergő
Fotokatalizált C–C kapcsolási reakció optimalizálása kísérlettervezéssel
Témavezető: Dr. Kupai József habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Elnök: **Dr. Nagy József** c. egyetemi tanár
Titkár: **Varga Bertalan** PhD-hallgató
Koordinátor: **Dr. Bell Evelin** egyetemi adjunktus
Dr. Rapi Zsolt egyetemi docens
Külső tag: **Dr. Novák Tibor** vezető kutató, Servier Gyógyszerkémiai Kutatóintézet Zrt.

Helyszín: **Ch. C14.**

8:30 Bese Cintia
Potenciálisan bioaktív P-vegyületek szintézise α-aminofoszfonátok acetilénszármazékokra való addíciójával
Témavezető: Dr. Keglevich György egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:45 Batizi Benedek
Bacillamid alkaloidok és antipódjaiknak enantioszelektív szintézise
Témavezető: Pollák Patrik PhD-hallgató
EGIS Gyógyszergyár Zrt.

9:00 Raduly Amália
Homok mint heterogén katalizátor a poli(etilén-tereftalát) gazdaságos depolimerizációjában
Témavezető: Dr. Kupai József habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:15 Győrfi Sára
Aldehidek reduktív éteresítése, egy nem szokványos hidridtranszfer
Témavezető: Dr. Soós Tibor kutatócsoport-vezető
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Hegedüs Kristóf tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Forman Ferenc tudományos segédmunkatárs
ELKH TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport

9:30 Nguyen Van Nghiem
Electrochemical oxidation reactions of di(pyridin-2-yl)amine
Supervisor: Dr. Ervin Kovács research fellow
HUN-REN RCNS IMEC Polymer Chemistry and Physics Research Group

9:45 Szünet

10:00 Hahn Vencel Károly
Dinamikus aszimmetrikus indukció sajátságainak vizsgálata az első koronaéterrel katalizált enantioszelektív áramlásos Strecker-reakció felfutási szakaszában
Témavezető: Dr. Golcs Ádám egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Burkódi Mikes
Apparicin új, enantioszelektív totálszintézisének vizsgálata
Témavezetők: Dr. Soós Tibor kutatócsoport-vezető
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Hegedüs Kristóf tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Forman Ferenc tudományos segédmunkatárs
ELKH TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport

10:30 Szloboda Kristóf
3-Hidroxi-tetrahidrofoszfinin-oxidok előállítása és foszfinoilezése
Témavezető: Dr. Keglevich György egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:45 Papp Márton
Potenciális TRADD-TRAF2- és c-FLIP-inhibitorok totálszintézise
Témavezető: Dr. Bálint Erika egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:00 Lam Thi Da Thao
Electrosynthesis of 2,3,4,5-tetrahydro-1,3,5-triazin-1-iums using *N*-methylamines
Supervisor: Dr. Ervin Kovács research fellow
HUN-REN RCNS IMEC Polymer Chemistry and Physics Research Group

11:15 Szünet

11:30 Kovács Márton
Foszfortartalmú hibrid molekulák fejlesztése: vindolin és krizin daganatellenes potenciáljának növelése
Témavezető: Halmai Mónika PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:45 Ferenczi Ákos
Seladelpar intermedierjeinek áramlásos kémiai szintézise 3D-nyomtatott reaktorokban
Témavezető: Dr. Bálint Erika egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

12:00 Palotai Gitta Dóra
CarDiPy fluorofóregységet tartalmazó vegyületek szintézise
Témavezető: Dr. Kovács Ervin osztályvezető-helyettes
BrainVisionCenter Kft., Biológiai Kémia Osztály

12:15 Répási Gergely Balázs
Prolinkatalizált aszimmetrikus Heck-reakció a természetes vegyületek szintézisében
Témavezetők: Dr. Soós Tibor kutatócsoport-vezető
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Hegedüs Kristóf tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport

A DOLGOZATOK ÖSSZEFOGLALÓI

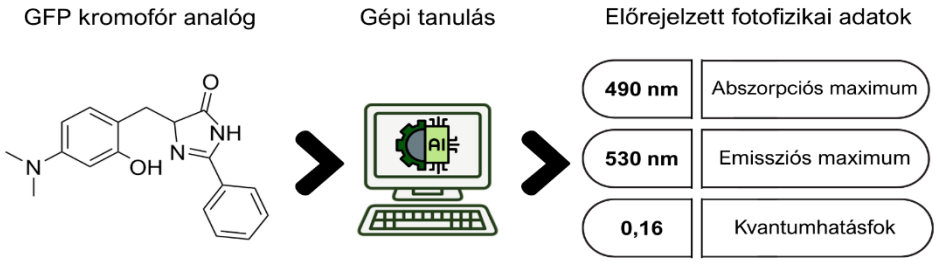
Fluoreszcens GFP-kromofórok fotofizikai tulajdonságainak előrejelzése gépi tanulással

Györök Ákos, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Kovács Ervin** kémiai osztályvezető-helyettes
BrainVisionCenter Kft.
Dr. Pavel Sidorov egyetemi docens
Hokkaido University ICReDD
Konzulens: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A fluoreszcens mikroszkópia mára elterjedt eszköz a biomolekuláris folyamatok vizsgálatában, azonban a legtöbb biomolekula nem bocsát ki fényt, így külső fluoreszcens jelölők alkalmazására van szükség. A zöld fluoreszcens fehérje (Green Fluorescent Protein, GFP) kromofórjának analógjaira épülő kis molekulájú fluorofórok fejlesztésében meghatározó a szerkezet és a fotofizikai tulajdonságok közötti kapcsolat feltárása.

Kutatásunk célja olyan gépi tanulási modellek fejlesztése volt, amelyek képesek a fluoreszcens kromofórok abszorpciós és emissziós maximumainak, valamint kvantumhatásfokának előrejelzésére. Több mint száz GFP-kromofór analóg mérési adatainak használatával a gépi tanulásos algoritmusok hiperparamétereit kiterjedten optimalizáltuk, és keresztvalidációval értékeltük a modellek megbízhatóságát.



1. ábra: A GFP-kromofór analógok fotofizikai tulajdonságainak előrejelzése gépi tanulási modellekkel.

A legjobb regressziós modellek $R^2 \approx 0{,}9$ értékeket értek el, valamint a kvantumhatásfok osztályozására fejlesztett modell is jó predikciós képességet mutatott a gyenge és erősebb fluoreszcenciájú molekulák elkülönítésében. Külső validálásként új kromofórt szintetizáltunk, és spektroszkópiailag karakterizáltuk. Az előrejelzések megfelelő pontosságúnak bizonyultak a modellek gyakorlati alkalmazhatósága és a fluoreszcens tulajdonságok előzetes szűrése szempontjából.

Eredményeink igazolják, hogy a gépi tanulási megközelítés hatékony eszköz lehet új fluoreszcens festékek tulajdonságainak becslésére és kísérleti fejlesztésük támogatására, ezáltal jelentősen csökkentve a kísérleti munka idő- és erőforrásigényét.

DFT kontra TD–DFT: Melyikkel követünk el nagyobb hibát foszfortartalmú fotoiniciátor molekulák UV–Vis-spektrumainak szimulálásakor?

Virág Bogdán, IV. évf. (BSc)

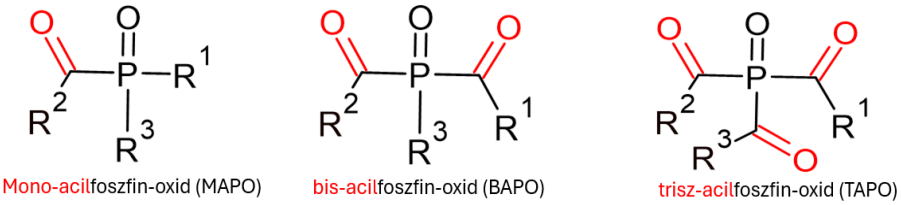
Témavezető: **Dr. Benkő Zoltán** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A korszerű ipari polimerizációs alkalmazásokban a foszfortartalmú fotoiniciátorok egyre nagyobb szerepet töltenek be a kedvező optikai tulajdonságuk miatt. Ezen molekulacsalád különböző ligandumokkal ellátott képviselőinek UV–Vis-spektrumának szimulációja kihívást jelent, ezért az alkalmazható elméleti kémiai módszerek pontosságának feltérképezése elengedhetetlen.

Kisméretű foszfin-oxid fotoiniciátor-molekulák (1. ábra) geometriáját, illetve a hozzá tartozó UV–Vis-spektrumát modelleztem sűrűségfunkcionál elméleten alapuló módszerekkel, különböző funkcionálok (B3LYP-D3, cam-B3LYP, ωB97X-D, M06-2X) és báziskészletek (Pople-, Dunning- és Karlsruhe-báziskészlet) alkalmazásával. A számítások fő célja a megfelelő módszer-báziskészlet kombináció megtalálása volt, melyek később nagyobb méretű fotoiniciátor-molekulák tervezéséhez felhasználhatóak. Referenciának a geometriák optimálásához hullámfüggvény alapú módszereket (MP2, CCSD), míg gerjesztett állapotok számításához a másodrendű algebrai diagramfelépítő módszert (ADC(2)) használtam. Továbbá felmértem különböző báziskészletekkel a módszerek báziskészletfüggését, illetve számítási igényét.

Munkám során jelentős spektrumbeli eltérésekre lettem figyelmes a különböző módszer-báziskészlet-kombináció esetén. Az optimált geometriákat megvizsgálva a szerkezetekben O=P-C=O diéderes szögben (P=O és a közvetlen mellette lévő acilcsoport C=O egysége között) nagymértékű különbségek jelentkeztek, ezzel befolyásolva a köztük kialakuló, a spektrumokat befolyásoló kölcsönhatások mértékét.

Az adatokat elemezve kiderült, mekkora a bizonytalanság a DFT- és a TD–DFT-számításokban, illetve melyik számítás (azaz a geometriaoptimálás vagy a gerjesztések szimulációja) befolyásolja jelentősebb mértékben a molekula UV–Vis-spektrumát.



2. ábra. Foszfortartalmú fotoiniciátor-molekulák konstitúciós képlete. Munkámban R^n=Me.

Komplex analitikai módszerfejlesztés extracelluláris vezikulák proteomikai és glikoproteomikai vizsgálatára

Horváth Virág Nikolett, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Turiák Lilla** tudományos főmunkatárs
HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport
Balbisi Mirjam tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Pécs Miklós** ny. egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az extracelluláris vezikulák (EV-k) kisméretű (30-1000 nm-es), lipidmembránnal határolt részecskék, amelyeket a sejtek az extracelluláris térbe bocsátanak ki, és amelyek központi szerepet töltenek be a sejtek közötti kommunikációban. Közülük külön alcsoportot alkotnak a 200 nm-nél kisebb átmérőjű kisméretű EV-k (*small extracellular vesicle*, sEV), amelyek a daganatos betegségek kialakulásában, illetve előrehaladásában is közreműködhetnek, emiatt vizsgálatuk kiemelten fontos.

A proteomika egy biológiai rendszerben előforduló fehérjék tulajdonságainak vizsgálatával foglalkozó tudományterület, amely magában foglalja a fehérjék minőségi és mennyiségi analízisét, a szerkezetük és funkcióik elemzését, valamint a poszt-transzlációs módosulások (PTM) vizsgálatát. A PTM olyan kovalens módosulást jelent, amelynek során a fehérjeláncra nem fehérje-jellegű csoportok kapcsolódnak, pl. glikoziláció, foszforiláció. Mivel az EV-k jellemzően nagyon kis mennyiségben állnak rendelkezésre, a proteomjuk és a PTM-jeik vizsgálatához érzékeny analitikai módszerek szükségesek.

Munkám első részében különböző, A549 tüdődaganatos sejtvonalból származó sEV izolálási, illetve az azokat követő emésztési módszerek hatékonyságát teszteltem le: méretkizárásos kromatográfia (SEC) ammónium-bikarbonát oldattal vagy foszfát pufferrel, majd oldószercsere, etanolos kicsapás, vagy SP3 mágneses gyöngy alapú tisztítás. Kvalitatív proteomikai szinten a legjobbnak az etanolos kicsapás bizonyult, ezt követte az oldószercsere. Kvantitatív proteomikai szinten a két módszer hasonlóan teljesített.

Ezt követően különböző *N*-glikopeptid dúsítási módszerek hatékonyságát vizsgáltam sejtlizátum mintákon: acetonos kicsapás, hidrofil interakciós kölcsönhatás (HILIC) alapú dúsítás gyári és saját készítésű oszlopokon, valamint porózus grafit alapú dúsítás. A legjobb eredményeket az acetonos kicsapás esetén sikerült elérni, de a dúsítás hatékonysága ebben az esetben sem kielégítő, így további alternatív dúsítási módszerek tesztelése lesz szükséges a későbbiekben.

Végül szintén A549 sejtvonalból izolált sEV mintákon vizsgáltam meg, hogy ha a proteomikai emésztést nem oldatban, hanem egy alternatív mintaelőkészítési módszerrel (S-Trap oszlopokon) végezzük, majd a glikopeptideket acetonos kicsapással dúsítjuk, az milyen hatással van a proteomikai és glikoproteomikai profilra. Az S-Trap oszlopokon végzett emésztés esetén több fehérjét, de kevesebb glikopeptidet sikerült azonosítani, így glikoziláció vizsgálata esetén érdemes az emésztést oldatban végezni. A kvantitatív proteomikai analízis alapján az S-Trap-es emésztés rosszabbul teljesített az oldatos emésztéshez képest.

Az elvégzett módszerfejlesztések hozzájárulhatnak a mintaelőkészítés megbízhatóságának javításához, valamint, hogy a jövőbeni biológiai vizsgálatok részletesebb képet adhassanak az EV-ről és azok élő szervezetben betöltött szerepéről.

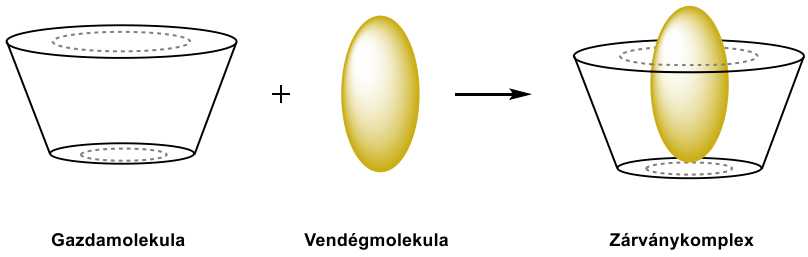
3,3-Diszubsztituált oxindolok komplexálásának vizsgálata ciklodextrinekkel

Németh Emese, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Bálint Erika** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulensek: **Rávai Bettina** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Steinsits Dániel PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az oxindolok és származékaik jelentős biológiai aktivitással rendelkeznek, igazolták már gyulladáscsökkentő, fájdalomcsillapító, tumorellenes, antioxidáns és Alzheimer-kór ellenes, valamint kinázinhibitor és antibakteriális hatásukat,[1] így az elmúlt évtizedekben több gyógyszerkutatási program célja volt szintetikus képviselőik előállítása.

Az oxindolvázat tartalmazó vegyületek azonban sok esetben kis vízoldhatósággal rendelkeznek, mely korlátozza a gyógyszerhatóanyagként történő felhasználhatóságukat. Kutatómunkám során kétféle oxindolszármazék különböző ciklodextrinekkel (CD-ek) történő komplexálhatóságának vizsgálatát tűztük ki célul. A CD-k olyan ciklikus oligoszacharidok, melyek speciális, csonkakúp alakú szerkezettel rendelkeznek, így képesek más vegyületeket (vendégmolekula) a szerkezetük belsejébe „befogadni”, ezzel növelve azok vízoldhatóságát, kémiai stabilitását és biológiai hozzáférhetőségét.



Nyolc különböző CD-származékkal végeztem fázisoldhatósági vizsgálatokat, az eredmények kiértékelésére HPLC és UV-VIS műszeres analitikai módszereket használtam. Ezek alapján kiválasztottam a komplexképzésre leginkább alkalmas CD-származékokat, majd a komplexeket kipreparáltam, és jellemzésükre, valamint a komplexképződés igazolására NMR-méréseket végeztem.

(1) Kaur, M.; Singh, M.; Chadha, N.; Silakari, O. *Eur. J. Med. Chem.* **2016**, *123*, 858–894.

Felületi akusztikus hullámokkal a szívizomkárosodás nyomában: pontos időpont és súlyosság egyetlen bioszenzorral

Rokonay Szonja, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Simon László Ferenc** egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A kardiovaszkuláris betegségek világszerte a vezető halálokok közé tartoznak. Leggyakoribb formájuk az *akut miokardiális infarktus* (AMI), amely során a szív vérellátásáért felelős koszorúér részben vagy teljesen elzáródik, így iszkémiás állapot alakul ki és a szívizomsejtek nekrózis útján elhalnak. Az elmúlt évtizedekben a diagnosztikai módszerek fejlődése jelentősen javította a betegek túlélési és gyógyulási esélyeit, amivel párhuzamosan egyre újabb tudományos célkitűzések kerülnek előtérbe a mielőbbi és még pontosabb diagnosztizálás céljából. Éppen ezért az orvosi diagnosztikában egyre hangsúlyosabb szerepet kapnak a biomarker mérésen alapuló módszerek, melyek megbízható információt szolgáltatnak a betegségek jelenlétéről és előrehaladásáról. A *szívspecifikus troponin I fehérje* (cTnI) kizárólag a kardiomiociták nekrotikus elhalása során kerül a keringésbe a *troponin komplex* bomlásának eredményeként, így az AMI legmegbízhatóbb biomarkerének tekinthető. Mivel a szívizom elhalás 85%-a a tünetek megjelenését követő első két órában történik, a korai diagnózis felállítása kiemelt fontosságú, különös tekintettel, hogy az egyes marker fehérjék koncentrációjának aránya időfüggő változást mutat. A mielőbbi diagnosztikában a betegágy melletti (*point-of-care*, POC) gyorstesztek jelenthetnek áttörést, hiszen ezek szakértő jelenléte nélkül, percek alatt szolgáltatnak kvantitatív információt.

Kutatómunkám során célul tűztem ki, hogy a szívspecifikus troponin fehérjék detektálására alkalmas, antitest alapú bioszenzort fejlesszek. Ennek első lépéseként négy, különböző cTnI epitópra specifikus antitestet karakterizáltam *képalkotó felületi plazmon rezonanciás módszerrel* (SPRi). A kötőkapacitás vizsgálata és a kinetikai paraméterek meghatározása mellett azonosítottam azt az antitest párt is, amely a leginkább alkalmas szendvics komplex kialakítására a cTnI és troponin diagnosztikája során. Az SPRi kiváló alapot szolgáltat a kutatás-fejlesztéshez, azonban nem alkalmas rutinszerű diagnosztikai felhasználásra magas költsége és időigényes használata miatt. Orvosdiagnosztikai alkalmazásra *felületi akusztikus hullám* (SAW) *alapú bioszenzort* fejlesztettem, amely kiválóan működik a POC diagnosztikában. A kvantitatív információ mellett sikerült jelölésmentesen, egy lépésben meghatároznom a *troponin komplex* és *cTnI alegység* arányát. Mivel a keringésben a troponin különböző előfordulási formáinak aránya időfüggő változást mutat, így a szenzor egyedülálló módon biztosíthat lehetőséget a szívizom roncsolódás pontos idejének meghatározására és szélesebb körű, megbízhatóbb felhasználást tesz lehetővé a jelenlegi kereskedelmi szenzorokhoz képest. Ezáltal nemcsak a betegség jelenléte igazolható, hanem a kialakulás óta eltelt idő is pontosan becsülhetővé válik, ami új távlatokat nyithat a terápiás hatékonyság növelésében.

Fluoreszcens biomolekulát tartalmazó tabletták hatóanyag-tartalmának vizsgálata UV-képalkotással

Kasoly Csenge Anna, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Dr. Galata Dorián László** Marie Curie Fellow
School of Engineering, University of Leicester

A gyógyszeriparban nagyon fontos, hogy a beteghez eljutó termékek minősége megfelelő és konzisztens legyen. A leggyakoribb gyógyszerforma a tabletta, így különösen fontos, hogy az ilyen típusú termékek az előírásnak megfelelőek legyenek. A legelterjedtebb minőségellenőrzési módszerekkel off-line módon vizsgálják a tablettákat, és statisztikai alapon a sarzsból kivéve csak néhány tablettát mérnek, majd az eredmény alapján következtetnek az egész sarzs minőségére. Ennek hátránya, hogy nem ellenőrizhető az összes termék, időigényes a módszer és a megvizsgált tabletták megsemmisülnek. Manapság egyre inkább elterjednek a folyamatelemző technológiák, amelyeknek lényege, hogy in-line, gyorsan és nem destruktív módon az összes tabletta megvizsgálásával követik nyomon a termékek minőségét. Ilyen többek között a digitális kamerát alkalmazó UV-képalkotás. A tablettáknál a hatóanyag-tartalom az egyik legfontosabb jellemző, amit vizsgálnak, ugyanis ez határozza meg, hogy a gyógyszerkészítmény milyen hatással lesz a beteg szervezetére.

A kutatómunkám célja az volt, hogy a kutatócsoportban kifejlesztett UV-képalkotás módszerét kiterjesszem fehérje típusú hatóanyagok vizsgálatára is. Ennek érdekében a munkám során UV-képalkotás segítségével vizsgáltam meg különböző koncentrációjú triptofán, és laktáz enzim tartalmú tablettákat. Ezek a tabletták látható fényben egyszínű fehérnek látszanak, viszont UV-fényben a triptofán fluoreszcens jellege miatt a hatóanyag színessé válik. Így, azokat UV-fényben lefotózva, és a képek színeit elemezve következtetni lehet a tablettában lévő hatóanyag koncentrációjára.

Én először a triptofánt tartalmazó tablettákat értékeltem úgy, hogy a képeket különböző színterekben vizsgálva összefüggést kerestem az adott szín komponens és a tabletta hatóanyag-tartalma között. Referencia mérésnek fluoreszcens detektálásos HPLC-t használtam. Ezután a laktázenzimet tartalmazó tablettákat vizsgáltam hasonló módon. Az itt kapott eredményeket UV-spektrofotometriás méréssel vetettem össze. A vizsgálataimmal arra keresem a választ, hogy a tabletták hatóanyag-tartalma vizsgálható-e UV-képalkotással, és a módszer használható-e biohatóanyag/fehérje tartalmú termékek olcsó, gyors és nem destruktív minőségellenőrzésére. Valamint a jövőben ez az analitikai módszer kiterjeszthető-e más fehérje jellegű biomolekulákra is, amiket egyéb módszerekkel nehezebben lehetne mérni.

Foszfortartalmú policiklusos aromás szénhidrogének optikai tulajdonságainak kvantumkémiai vizsgálata

Csipkó Hanga Zoé, 12. évf. (középiskola)

ELTE Apáczai Csere János Gimnázium, Budapest

Témavezetők: **Dr. Benkő Zoltán** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Fekete Csilla PhD-hallgató
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A számítógépes modellezés és a molekulatervezés mára népszerű eszközzé vált a kémiai és anyagtudományi kutatásokban, hiszen lehetőséget ad a vegyületek szerkezetének és tulajdonságainak előrejelzésére, így jelentősen csökkenthető a kísérletekhez szükséges erőforrás. Kiemelten fontos területet jelent az optikai tulajdonságok vizsgálata, mivel ezek meghatározzák a molekulák alkalmazhatóságát olyan korszerű felhasználásokban, mint például az OLED-ek (szerves fénykibocsátó diódák) vagy szenzorok. A policiklusos aromás szénhidrogének (PAH-ok) konjugált π-elektronrendszerük révén különösen ígéretes jelöltek ezen a területen, kisebb szerkezeti módosításaikkal pedig finoman hangolhatóak lehetnek az elektronikai és fotofizikai jellemzők.

A kutatásom során foszfortartalmú, PAH-vázzal rendelkező molekulákat vizsgáltam szisztematikusan kvantumkémiai módszerekkel. A molekulák közös sajátossága, hogy az öt vegyértékű foszforhoz kapcsolódó megfelelő szubsztituensekkel kiralitáscentrumok hozhatók létre, így optikailag aktív szerkezetek jönnek létre. A vizsgálatok során a vegyületek ultraibolya-látható (UV–Vis) és cirkuláris dikroizmus (CD) spektrumait szimuláltam, melyekhez sűrűségfunkcionál-elméleten (TD-DFT) és hullámfüggvényen alapuló (ADC(2)) módszereket alkalmaztam. A szerkezet–tulajdonság összefüggések elemzésekor arra a kérdésre kerestem választ, hogy mely szerkezeti tényezők – például a konjugált rendszer mérete, a foszfortartalmú gyűrű tagszáma vagy a molekula síkbeli jellege – befolyásolják leginkább az optikai viselkedést.

A kapott eredmények várhatóan közvetlenül is hozzájárulhatnak a kísérleti munkához, mivel lehetővé teszik a legalkalmasabb molekulák kiszűrését még a kísérletek elvégzése előtt, segítve az anyagtudományi fejlesztések hatékonyabb megvalósítását.

Karboránkapcsolt foszfor heterociklusok aromásságának vizsgálata

Szántai Lóránt István, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Kelemen Zsolt** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Konzulens: **Gál Dalma** PhD-hallgató
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Munkám során olyan foszfor tartalmú gyűrűs vegyületeket vizsgáltam, melyek karboránokhoz kapcsolódnak. Hasonló típusú vegyületeknél felmerült, hogy a gyűrű aromás konjugációja a 3D-aromás karboránnal. Kvantumkémai számítások segítségével vizsgáltam e vegyületek aromás karakterét, többek közt a kötéshosszak vizsgálatával, izodezmikus reakciók számításával, valamint a mágneses tulajdonságok számításával. Megállapítottam, hogy a kapcsolódó gyűrűk ebben az esetben sem mutatnak aromás karaktert, sőt bizonyos származékok kettősgyök karaktert mutatnak. E vegyületek alkalmasak lehetnek kis molekulák aktiválására. Ezért kísérletet tettem e vegyületek előállítására.

Laboratóriumi munkám során előállítottam a megfelelő prekurzorokat és megkíséreltem a fentebb tárgyalt vegyületek előállítását.

REIMS- és FT–IR-technika alkalmazása patológiai metszeteken

Török Csongor, IV évfolyam (BSc)

Témavezető: **Dr. Kontsek Endre** tudományos munkatárs
SE Patológiai, Igazságügyi és Biztosítási Orvostani Intézet
Konzulens: **Borkovits Bendegúz** PhD-hallgató
ELTE Fizikai és Csillagászati Intézet

Bevezetés

A patológiai minták vizsgálata modern műszeres analitikai módszerekkel napjainkban is kiemelt figyelemre ad okot. Az ilyen mérésekre alkalmaznak közép-infravörös spektroszkópiát (mid-infrared, MIR) és tömegspektrometriát (mass spectrometry, MS), azonban ezek kombinálásából létrejövő multimodális technikák még egyáltalán nem kerültek be a klinikai gyakorlatba. Ezen vizsgálatok elterjedéséhez további módszerfejlesztések szükségesek, mint az alkalmazott szövettani minták kiválasztása, előkészítése, mérési elrendezés és a szövetvastagságok optimálása.

Célkitűzés

Jelen kutatás célja gyors elpárologtatású ionizációs tömegspektrometria (rapid evaporative ionization mass spectrometry, REIMS) és Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia (Fourier transform infrared spectroscopy, FT–IR) alapú technikákkal mért humán vastagbélrák szövetminták ideális metszetvastagságának meghatározása.

Módszerek

Vastagbélrákot, nem tumoros nyálkahártyát és májáttétet tartalmazó szöveti mikrosorozatot (tissue microarray, TMA) készítettünk a Semmelweis Egyetem Patológiai, Igazságügyi és Biztosítási Orvostani Intézetében. A blokkból 8–8 metszetet készítettünk 2 és 16 µm közötti vastagságokkal, 2 µm lépésközzel. A kiválasztott vastagságú szöveteket infravörös spektroszkópiával és tömegspektrometriával is feltérképeztük.

Következtetés

Várható módon MIR esetében a vastagság csökkentésével a jel is növekedik, míg MS alkalmazásánál ennek a fordítottja történt. Továbbá elmondható, hogy kis vastagságok esetén az alumínium gőzölt lemez jobb eredményeket mutat.

Egy foszfinin-borán Lewis-pár és víz reakciójának kvantumkémiai feltérképezése

Horváth Júlia Boglárka, III. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Benkő Zoltán**, egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Horváth Ádám, PhD-hallgató
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az elmúlt 10 évben a foszfininek (vagy foszfabenzolok) mind a kísérleti mind a számításos kémia területén intenzíven kutatott vegyületcsaláddá váltak. Ezekben a vegyületekben a P=C kettős kötés részt vesz az aromás rendszer kialakításában, ezzel elveszítve nagymértékű reaktivitását. Ennek következményeként a foszfininek inertek kisebb molekulákkal, mint például a vízzel és alkoholokkal szemben. Viszont a foszfininek mint Lewis savak, megfelelő Lewis bázissal különleges - a frusztrált Lewis-párokhoz hasonló - reaktivitást mutató Lewis-párokat képeznek. A 3,5-bisz(trimetilszilil)-foszfinin és a trisz(pentafluorofenil)-borán által alkotott Lewis-pár vízzel történő reakcióját figyelte meg az együttműködő kutatócsoport (Prof. Christian Müller, Freie Universitat Berlin)

A reakció során két termék keletkezik: az 1,2- illetve az 1,4-dihidrofoszfinin oxid-borán adduktok. A reakció mechanizmusának kvantumkémiai felderítése során megállapítottam, hogy a reakció lejátszódása a víz és a borán vegyület között létrejövő koordinációnak köszönhető, hiszen a Lewis-pár víz hatására a foszfinin és borán vegyületre bomlik. Eközben az utóbbihoz vízmolekulák koordinálnak, ami így már képes megtámadni a gyűrűben lévő foszforatomot. A reakció lejátszódására két különböző de hasonló mértékben valószínű útvonalat is alaposan megvizsgáltam. Az első egy 1,2- illetve 1,4-addíció, amelyek során a víz egyik hidrogénatomja a 2-es (*orto*) vagy 4-es (*para*) helyzetű szénatomra kerül, miközben kialakul a P-O kötés. Az így létrejött köztitermék tautomerizáció során alakul termékké, mely során ki tud alakulni a reakció hajtóerejét biztosító P=O kettős kötés. A második lehetséges útvonal első lépésében a foszforatom inzertálódik a boránnal aktivált vízmolekula egyik O–H kötésébe. A keletkezett köztitermék továbbalakul a megfelelő termékké egyhidrogén-vándorlási reakcióban az *orto*- vagy *para*-helyzetű szénatomra. A mechanizmus felderítése során azt is megállapítottam, hogy mindkét reakcióút második lépését elősegíti egy további vízmolekula jelenléte.

Nagy kétfoton-keresztmetszetű feszültségszenzor szintézise és alkalmazása a membránpotenciál követésére

Veres Milán, IV. évf. (Bsc)

Témavezetők: **Dr. Cseri Levente** senior vegyész
BrainVisionCenter Non-profit Kft.
Dr. Kupai József habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A sejt membránpotenciáljának gyors és pontos követése alapvető szerepet játszik a neuronműködés feltérképezésében. Bár a feszültségérzékeny festékek szenzorként való alkalmazása ígéretes lehetőséget kínál, a jelenleg biológiai képalkotásra használt festékmolekulák átlagos vagy alacsony kétfoton-keresztmetszettel bírnak. Az elektronikus átmenetek gerjeszthetősége két foton együttes elnyelésével, amit a kétfoton-keresztmetszet fejez ki, rendkívül fontos a kétfoton-mikroszkópiás kutatásokban a megfelelő fluoreszcens jel eléréséhez.

A kutatómunkám célja egy potenciálisan nagy kétfoton-keresztmetszettel rendelkező feszültségszenzor szintézise volt. A szintézis során a biokompatibilitást figyelembe véve módosítottam egy irodalmi fluorofórt. Kvaterner ammónium egységek beépítése a festékmolekula oldhatóságát javította és lehetővé tette, hogy a plazmamembránban megfelelően orientálódjon. A szenzor tulajdonságait abszorpciós és fluoreszcens spektroszkópiai kísérletekben karakterizáltam különböző oldószerekben és mesterséges liposzómák jelenlétében. A festékmolekula 486–514 nm tartományban nyelt el különböző oldószerekben és 628–702 nm tartományban mutatott fluoreszcenciát. A közeg viszkozitásával nőtt a fluoreszcencia, továbbá sav jelenlétében is intenzívebb emisszió volt megfigyelhető, ami a horgonyrész aminocsoportjának fluoreszcenciamodulaló szerepére utal.

Az alkalmazhatóság vizsgálatára HEK-sejtvonalon végeztünk kétfoton-mikroszkópiás kísérleteket, ahol a szenzor nagy kontraszttal festette a sejtmembránt alacsony lézererősség mellett is. Továbbá kísérletet tettem feniletinil hidrofób oldallánc szintézisére is, ahol a monomer keletkezése mellett megfigyeltem dimer és trimer melléktermékek keletkezését is. Ezekkel a származékokkal a szenzorcsalád kiterjesztését és szerkezet-hatás összefüggések vizsgálatát tervezem. Az előállított új feszültségszenzor demonstrálja a nagy kétfoton-keresztmetszettel bíró fluorofórok funkcionális módosításának lehetőségét, ami egyúttal fontos eszközt adhat a jövő neurobiológiai kutatásaihoz.

Enantiomerszűrés rezolválószerekkel kovalensen módosított mikrotálcákon

Szegedi Dorka, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Golcs Ádám** egyetemi adjunktus
BME VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulensek: **Dr. Huszthy Péter** Professzor Emeritus, az MTA rendes tagja
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Ádám Bálint Árpád PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A mikrotálcák a nagy áteresztőképességű laboratóriumi kísérletek alapvető eszközei, amelyeket a gyógyszeripar széles körben alkalmaz párhuzamos szintézisek, reakcióoptimalizálás, preklinikai vizsgálatok és nagy áteresztőképességű szűrési technikák során. Népszerűségük elsősorban nagy kapacitásuknak, valamint az egységes méret- és tulajdonságprofiljuknak köszönhető, amely lehetővé teszi hatékony integrációjukat modern, automatizált laboratóriumi rendszerekbe. Ennek következtében ezen polimer alapú eszközök innovatív alkalmazásainak fejlesztése kiemelt jelentőségű.

Kutatómunkám célja egy általánosítható felületmódosítási módszer fejlesztése volt porózus poli(vinilidén-fluorid) (PVDF) polimerre, amelyet gyakran alkalmaznak szűrőtálcák membrán-anyagaként. A kutatócsoport előzetes munkájában a membránokat atmoszférikus nyomású levegőplazmával aktiválta, amelyet követően különböző szelektormolekulák kovalens rögzítésével valósítottam meg a felületi funkcionalizálást. Az így kialakított rendszerek sikeresen alkalmazhatók voltak királis aminok racém elegyeinek párhuzamos, nagy áteresztőképességű elválasztására. A membránon történő transzport és szeparáció hatékonyságát UV/Vis-spektroszkópiával és polarimetriás technikákkal mértem.

A szelektormolekulák és vendégmolekulák közötti kölcsönhatások jellegét és stabilitását *in silico* módon, dokkoló szimulációkkal is vizsgáltam, ahol a komplexképződés kötődési szabadentalpiáját elemeztem. A szimuláció alapján meghatároztam a legvalószínűbb intermolekuláris kölcsönhatások típusát és pozícióját (pl. hidrogénkötés, π–π és π–kation kölcsönhatások).

A fejlesztett mikrotálca alapú eszköz, mely kompatibilis a modern automatizált laboratóriumi rendszerekkel, lehetőséget kínál enantiomerkeverékek nagy áteresztőképességű elválasztására, preparatív lépték alatti mintamennyiségek esetében.

Fotokatalizátor-nanoszemcsék kapszulázása tanninsavval adalékolt kitozánbevonatokban

Yu Lang Richard, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulensek: **Demény Petra** PhD-hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Dr. Márton Péter tudományos segédmunkatárs
HUN-REN EK MFA, BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A fotokatalizátor-nanoszemcsékben az elektromágneses gerjesztés hatására az elektronok a vegyértéksávból a vezetési sávba vándorolnak, ezzel „lyukakat" hagyva maguk után. Az így keletkező fotogerjesztett töltéshordozók képesek redoxi-reakciókon keresztül szerves szennyezőket degradálni. Szuszpenziókban történő felhasználás esetén gondot jelent a fotokatalizátorok és a tisztított víz elválasztása. Előrelépést jelenthet olyan membránok és/vagy bevonatok alkalmazása, amelyekben a kolloid méretű katalizátorszemcséket csapdázzuk, melyben biztosítjuk mind a szennyezőanyagok, mind a veszélytelen, fotodegradációs termékek (víz, CO_2) megfelelő sebességű diffúzióját.

A TDK-munkában célkitűzésem a csapdázó nanoréteg kialakítása különböző modellhordozókon, a bevonatok permeabilitásának tanulmányozása, valamint fotokatalitikus nanoszemcsék bevonatokban történő csapdázásának kidolgozása, és fotokatalitikus hatásuk demonstrálása UV és látható besugárzást alkalmazva. A célkitűzéseimnek megfelelően tanninsavval keresztkapcsolt kitozánbevonatokat állítok elő mártásos és/vagy forgótárcsás eljárással különböző (üveg-, szilícium- és cink-) felületeken. A fotokatalizátor-nanoszemcséket (TiO_2 és C_3N_4) a bevonatképzés előtt diszpergálom kitozán vizes oldatában. A tanninsav hatására kialakuló keresztkötéseket Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiával, a bevonatok vastagságát és fényáteresztését UV-látható spektroszkópiával, pásztázó szögű reflektometriával és spektroszkópiai ellipszometriával jellemzem, vízzel való kölcsönhatását peremszög-méréssel és duzzadásvizsgálatokkal, valamint elektrokémiai módszerekkel tanulmányozom. A kapszulázott fotokatalizátor-nanoszemcsékből kialakított bevonatok felületét röntgen fotoelektron-spektroszkópiával, a kompozitok fotoaktivitását színezék-degradációs tesztekkel, vízben oldott metilnarancs modell színezékanyaggal jellemzem.

Lángálló és lebomló: Politejsav kompozit habok fejlesztése a fenntartható építőipar számára

Kissová Szabina, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulensek: **Dr. Erdődi-Decsov Kata Enikő** tudományos segédmunkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Ötvös Bettina PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A műanyagok a 20. század második felétől meghatározó szerepet töltenek be a mindennapi életben, köszönhetően kedvező áraiknak, könnyű feldolgozhatóságuknak és tartósságuknak. Ugyanakkor környezeti és egészségügyi hatásaik komoly problémát jelentenek, ezért egyre nagyobb igény mutatkozik a fenntartható és bioalapú alternatívák iránt. Ezen anyagok közül kiemelt figyelmet kap a politejsav (PLA), amely biológiai lebonthatósága miatt ígéretes jelölt a kőolaj alapú polimerek kiváltására. Ugyanakkor a PLA gyenge lángállósága számos – elsősorban műszaki – felhasználási területen korlátozza ipari felhasználhatóságát.

Kutatómunkám célja olyan új, bioalapú szigetelőhabok fejlesztése, amelyek lángállóságuk révén biztonságosan alkalmazhatók, életciklusuk végén pedig ipari körülmények között komposztálhatók, így fenntartható alternatívát nyújtanak a poliuretán- és polisztirol-alapú szigetelőanyagokkal szemben.

Kutatómunkám során égésgátolt PLA-habokat állítottam elő, amelyeket különböző méretű és koncentrációjú cellulózszálakkal módosítottam. A cellulóz a vizsgálat középpontjába került, mivel töltőanyagként kedvező mechanikai tulajdonságokkal rendelkezik, szenesedő komponensként ígéretes szerepet tölthet be az égésgátlásban, továbbá egyszerűen feldolgozható és biológiailag lebomló. Vizsgálataim a cellulóz és a polifoszfát típusú égésgátló adalék kölcsönhatásainak, valamint ezeknek a kompozithabok szerkezetére, morfológiájára, lángállóságára és komposztálhatóságára gyakorolt hatásainak feltárására irányultak. Emellett elemeztem a habosítás funkcionális tulajdonságokra gyakorolt hatását is.

Kísérleti eredményeim szerint mindössze 5%, 60 μm átlagos szálhosszúságú cellulóz felhasználásával – a habsűrűség számottevő módosítása nélkül – 29%-ról 39%-ra növelhető az ammónium-polifoszfátot tartalmazó PLA-habok oxigénindexe, továbbá elérhetővé válik az UL 94 éghetőségi szabvány szerinti legjobb, V-0 besorolás. Ezen optimalizált égésgátló-cellulóz kombinációval mintegy 50%-kal mérséklődik a PLA-habok égése során mérhető maximális hőkibocsátási sebesség. Vizsgálataim alapján az égésgátolt PLA-kompozit habok ipari körülmények között komposztálhatók, lebomlási idejük 1 héttel (5 hétről 6 hétre) nő az adalékmentes PLA-referenciához képest.

Kutatási eredményeim hozzájárulhatnak a jövőben nulla energiaigényű épületek szigetelésére alkalmas, lángálló és komposztálható PLA-habtermékek kifejlesztéséhez. Ezáltal a kutatás elősegítheti a fenntarthatóbb és biztonságosabb építőipari megoldások elterjedését, valamint a fosszilis alapú műanyagok fokozatos kiváltását.

Luminescent Spinel Nanostructures Embedded in Silica Sol-Gel Coatings for Photonic and Anti-Counterfeiting Applications

Janny Franscesca Flórez González, IV. évf. (BSc)

Supervisors: **Rudolf M. Mátyás** PhD-hallgató
HUN-REN Wigner FKK SZOI Elméleti Szilárdtestfizika Osztály
Dr. Nagyné Dr. Albert Emőke egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Consultants: **Dr. Beke Dávid** tudományos főmunkatárs
HUN-REN Wigner FKK SZOI Elméleti Szilárdtestfizika Osztály
Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

This study investigates the incorporation of zinc gallate (ZGO) spinel nanoparticles doped with color centers such as chromium and manganese into compact SiO_2 sol-gel coatings for applications in sensory devices and anti-counterfeiting technologies. Spinel oxides with color centers offer several advantages, including multi-mode excitability (X-rays, UV–visible light, and thermal activation), persistent luminescence, and tunable, decay-dependent optical properties. These features make them promising for detecting harmful radiation, triggering biological treatments such as deep-seated photodynamic therapy, and enabling multi-level anti-counterfeiting solutions. For application, the materials must be compatible with diverse fabrication methods, processable, and available in a form suitable for integration. Thin films fulfill these requirements, as they can be deposited on a wide range of substrates—including flexible ones—while providing mechanical integrity and wear resistance.

The formation of thin layers using doped ZGO nanoparticles embedded in a silica matrix was optimized through dip-coating and spin-coating methods to obtain highly luminescent, uniform coatings and patterned structures tailored for the targeted applications. The nanoparticle concentration in the SiO_2 suspension and the resulting film thickness were identified as key parameters for achieving visible-range emissions specific to each dopant. Optimized layers, prepared from the best-performing synthesized nanoparticles and subjected to annealing at different optimal temperatures, exhibited enhanced luminescence. Photoluminescence (PL) and X-ray excited optical luminescence (XEOL) measurements confirmed the optical performance.

Keywords: zinc gallate, sol-gel coating, SiO_2 thin films, optical coating, photoluminescence, nanoparticles.

Nanokristályos cellulóz-lignin filmek

Szlovicsák Zita Margit, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Koczkáné Dr. Csiszár Emília** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Bódiné dr. Fekete Erika** tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A kutatómunkám során kristályos nanocellulóz (CNC) alapú és lignin tartalmú biokompozitok (filmek) előállításával és vizsgálatával foglalkoztam. A kristályos nanocellulóz alapú filmek számos előnyös tulajdonsággal rendelkeznek. Ezek közé sorolható a nagy szakítószilárdság, a kiváló oxigénzáró képesség és az átlátszóság. Kiváló minőségük, megújuló és biodegradálható jellegük miatt felhasználásukkal alternatívák lehetnek a hagyományos műanyagokkal szemben például a csomagolástechnikában. Hátrányuk viszont a ridegség, a törékenység és a sérülékenység, a vízérzékenység és a savas hidrolízis miatti gyengébb termikus stabilitás. A kedvezőtlen tulajdonságok javítására más polimerekkel, például ligninnel, együtt alkalmazzák. A lignin megújuló, aromás polimer és egy lehetséges műanyagipari adalékanyag. Manapság azonban még kevéssé elterjedt ezen a területen. Ennek az a magyarázata, hogy a cellulóz és a lignin eredeti formájukban nem ömleszthetők vagy oldhatók fel, ami jelentősen korlátozza felhasználásukat. Komplex és a feltárástól függő „véletlenszerű” szerkezete az újrahasznosítás szempontjából nagy kihívást jelent.

Kutatómunkám célja egyrészt a CNC-filmek negatív tulajdonságainak javítása volt ligninnel (vízoldható lignin-szulfonáttal), másrészt a lignin egy lehetséges újrahasznosításának bemutatása, amely magas hozzáadott értékű terméket eredményez. A nanocellulózt nyers lenből és fehérített lenből nyertem ki. A nyers lenből származó cellulóz nanokristályok tartalmaznak szerkezeti lignint, míg a fehérített lenből nyertek nem. Ebből kiindulva célom volt annak tisztázása, hogy a nanokristályos cellulóz szerkezeti lignin tartalma befolyásolja-e a hozzáadott lignin hatását az így előállított biokompozitok tulajdonságaira. Kétféle lágyítót (glicerin, szorbit) és több ligninkoncentrációt alkalmaztam. Vizsgáltam az így előállított filmek morfológiáját, optikai, termikus és mechanikai tulajdonságait, továbbá vízzel való kölcsönhatását. Dolgozatom tartalmazza a kétféle lenből nyert CNC-k vizes szuszpenziójának tulajdonságait is.

Tudományos diákköri munkám bizonyította, hogy a kristályos nanocellulóz szerkezeti és hozzáadott ligninnel való kombinálása valóban hatékonyan javította a belőlük készült vékony filmek mechanikai, UV-védő és termikus tulajdonságait.

Szelektív fényáteresztésű és víztaszító vékonyréteg-rendszerek transzparens és nem transzparens hordozókon

Kovács Kinga, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Nagyné Dr. Albert Emőke** egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Napjainkban a megújuló energiaforrások használata kiemelkedően fontos kérdés az energiagazdálkodás területén. Ilyen például a napenergia, amelyet lakossági szinten is hasznosítanak napelemek formájában. A fotovoltaikus napelemek fejlesztésében prioritást élvez a nagy hatékonyságú rendszerek létrehozása. A hagyományos (pl. Si) napelemek hatásfoka csökken a hőmérséklet emelkedésével, ezért célszerű olyan rendszereket kialakítani, amelyek csökkentik az infravörös sugarak melegítő hatását. Ugyancsak fontos (pl. hatásfok és karbantartási szempontból) az öntisztító napelemek fejlesztése is.

Kutatómunkám célja egyidejűleg szelektív fényáteresztést és víztaszító tulajdonságot mutató vékonyréteg-rendszerek fejlesztése különböző típusú hordozók felületén. A vékonyrétegeket nedves kolloidkémiai szol-gél módszerrel, „dip-coating" technikával alakítottam ki transzparens (üveg) és nem transzparens (szilícium) hordozók felületén. Vékonyrétegoptikai modellekkel feladatom olyan egy- vagy több vékonyrétegből álló rendszerek tervezése volt, amelyek a látható fény tartományában növelik, míg az infravörös tartományban csökkentik transzparens hordozójukhoz képest az átlagos transzmittanciát. Szilícium hordozók esetén ultraibolya és látható fénytartományban az antireflexió előnyös, míg infravörös tartományban a melegítő sugarak reflexiója célravezető, mellyel szilícium alapú napelemekben elkerülhető a hatásfok csökkenése. Víztaszító felületek létrehozásával – vagyis az öntisztító tulajdonság bevezetésével – ténylegesen multifunkciós rendszereket fejleszthetünk.

Modellezéssel a vékonyrétegek optikai paramétereinek függvényében meghatároztam a transzmittancia spektrumokat – és átlagos transzmittancia növekmény értékeket –, majd a célkitűzésnek megfelelően optimális vastagság és törésmutató értékeket határoztam meg, amelyek alapján választottam ki az elkészítendő prekurzorszolokat.

A kísérletileg kialakított bevonatok optikai tulajdonságait látható fényben transzparens hordozón UV-Vis spektrometriával, míg nem fényáteresztő hordozókon pásztázó szögű reflektometriával és ellipszometriai porozimetriával jellemeztem. A bevonatok szerkezetét pásztázó elektronmikroszkópos felvételek alapján tanulmányoztam, víztaszító tulajdonságukat peremszögméréssel vizsgáltam.

Üveghordozón annak mindkét oldalára mártással kialakított, több rétegű (mezopórusos titán-dioxid, mezopórusos szilika és hibrid szilika vékonyrétegekből felépülő) bevonatok esetén sikerült a látható tartományban pozitív (2,3%), míg az infravörös tartományban negatív (-10%) átlagos transzmittancia növekményt elérni, mindezt vízlepergető tulajdonság kialakítása mellett.

Vanádium-oxid-alapú vezetőképességi gázérzékelő

Király Anna, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Dücső Csaba** tudományos főmunkatárs
HUN-REN EK MFA Mikrotechnológiai Laboratórium
Konzulens: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A levegőben, az épített és a természetes környezetben előforduló mérgező gázok érzékelése nagyon fontos folyamatszabályozási, biztonságtechnikai és környezetvédelmi feladat, ami rendkívül nagyszámú megbízható és olcsó mérőeszközt igényel, melyek képesek kimutatni a leggyakoribb szennyező anyagokat, például NO, NO2, NH3, SO2, H2S és VOC-k, a határérték (TLV/ÁK) alatti koncentrációkban, jellemzően a ppm–10 ppm tartományban.

A vezetőkésség változáson alapuló, szilárdtest érzékelők előnye, hogy kis méretben, olcsón, nagy tömegben lehet őket gyártani, valamint nagy érzékenységű eszközök állíthatók elő. Működésének alapja, hogy az érzékelendő gáz molekulái kölcsönhatásba lépnek a fém-oxid felülettel, ezáltal az érzékelő réteg vezetőképessége drasztikusan megváltozik. Ahhoz, hogy a kemiszorpció megtörténjen, megemelt hőmérsékletre van szükség, amit egy mikrofűtőtest biztosít. A fűtőtest felületén mérőelektródok vannak, amelyek segítségével tudjuk követni az érzékelő réteg ellenállásának változását.

Munkám során a szakdolgozatomban részletesen bemutatott Si-alapú mikrofűtőtest struktúrát alkalmaztam, amely hordozóként szolgál a szelektíven leválasztott érzékelőréteg számára, és lehetővé teszi az ellenállás változás mérését. Mivel a félvezető tulajdonságú fém-oxid rétegek érzékenysége függ a szemcseméretől és a réteg morfológiájától, különböző összetételű, nano-szerkezetű vanádium-oxid rétegeket állítottam elő, amit nemesfém-részecskékkel érzékenyítettem.

Az érzékelők vizsgálatát többféle gázra végzetem el. A mérések során a legjobb érzékenységet a H2S kimutatásánál tapasztaltam, amit az érzékelő 0,3 ppm koncentrációban is ki tudott mutatni. A szenzorok válaszideje gyors, másodperces nagyságrendű, míg a teljes regeneráció több percet vesz igénybe. További kísérletek szükségesek az egységes vanádium-oxid fázis kialakítására, a páratartalom, valamint az egyéb mérgező gázokra való keresztérzékenység vizsgálatára annak érdekében, hogy végleges következtetéseket vonhassunk le az érzékelők gyakorlati alkalmazhatóságáról.

Munkámat az Energiatudományi Kutatóközpont Mikrorendszerek Laboratóriumában végeztem.

Égésgátló adalékok hatása a politejsav komposztálhatóságára

Lengyel Lívia, III. évf. (MSc)

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

Kutatásom célja polifoszfát típusú égésgátló adalékok hatásának vizsgálata a politejsav (PLA) komposztálhatóságára. A téma napjainkban különösen aktuális, hiszen egyre szélesebb körben terjednek a megújuló erőforrásokból előállítható biopolimerek. Ezek közül az egyik legígéretesebb a PLA, amelyet egyre nagyobb mennyiségben alkalmaznak különféle műszaki területeken is, ahol gyakran alapvető követelmény a termékek égésgátoltsága. A PLA térnyerése ugyanakkor annak is köszönhető, hogy a körforgásos gazdaság szemléletébe illeszkedve, ipari körülmények között igazoltan komposztálható. Emiatt kiemelten fontos annak vizsgálata, hogy a gyakran alkalmazott polifoszfát alapú égésgátlók milyen hatással vannak a PLA lebomlási képességére: akadályozzák-e, vagy kedvezőtlenül befolyásolják-e annak komposztálhatóságát.

A kutatási kérdések megválaszolása érdekében adalékmentes referencia-mintát, valamint ammónium-polifoszfáttal (APP-422), gyantával bevont ammónium-polifoszfáttal (APP-462) és melamin-polifoszfáttal (MPP) adalékolt PLA kompozitokat állítottam elő. A kísérleti munka első fázisában a felhasznált égésgátlók hatékonyságát szabványos oxigénindex (LOI) méréssel, UL-94 éghetőségi teszttel és kónikus kalorimetriás vizsgálatokkal értékeltem. Ezt követően a PLA referencia-mintát és az égésgátolt kompozitokat az ISO 20200:2004 szabvány szerint komposztáltam. A komposztokból meghatározott időközönként vett mintákat differenciális pásztázó kalorimetriával (DSC), termogravimetriával (TGA) és infravörös spektroszkópiával (FTIR) analizáltam, amelyek segítségével feltártam a PLA kémiai, anyagszerkezeti és termikus jellemzőinek komposztkörülmények között bekövetkező időbeli változását.

Eredményeim alapján a polifoszfát típusú égésgátlókkal módosított PLA kompozitok ipari aerob komposztálási körülmények között komposztálhatónak tekinthetők. Az égésgátlók jelenléte ugyanakkor befolyásolja a PLA lebomlási karakterisztikáját, különösen a bomlási fázisok kezdetét és időtartamát.

Eredményeim új ismereteket szolgáltatnak a biopolimerek tűzvédelmi adalékolása és komposztálhatósága közötti összefüggések feltárásához, ezáltal hozzájárulnak a fenntartható, körforgásos gazdaságban alkalmazható új anyagok fejlesztéséhez.

Folyamatos nedves granulálás külső granuláló folyadék hozzáadása nélkül

Tóth Richárd Ferdinánd, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Szabó Edina** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológiai Tanszék
Konzulens: **Fekete Dániel** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológiai Tanszék

A gyógyszeriparban mind a mai napig a gyógyszerkészítményeket túlnyomórészt szakaszos eljárásokkal készítik. Azonban az utóbbi időben a fogyasztói igények megváltozása, az ebből származó bizonyos gyógyszerek készlethiánya, az egyre drágulló originális, és generikus gyógyszerhatóanyagok fejlesztése, valamint a szakaszos eljárások használata során felmerülő egyéb problémák egyre inkább ösztönzik a gyártókat a folyamatos eljárásokra való áttérésre. Ezek a technológiák számos előnnyel jellemezhetők a szakaszos eljárásokhoz képest, amibe beletartozik például a folyamat jobb költséghatékonysága, robusztussága, rugalmassága, és a kisebb készülékméreteknek köszönhető jobb helykihasználása, könnyebb méretnövelése is. Utóbbi különösen fontos, a szakaszos eljárások nehézkes, időigényes, lassú méretnövelésével szemben.

A TDK-dolgozatom az egyik legfontosabb gyógyszerkészítmény gyártási lépéssel, a granulálással foglalkozik. A folyamat során az apró porszemcsék különböző hatásokra összetapadnak és nagyobb, úgynevezett agglomerátumok jönnek létre. Ilyen hatások lehetnek például a nagy nyomás (száraz granulálás), egy alacsony olvadáspontú kötőanyag megolvadása által létrejött granulátum képződés (olvadék granulálás), valamint valamilyen folyadék általi összekapcsolódás intermolekuláris kötések által (nedves granulálás). A nedves granulálás esetén a szakaszos eljárások egy lehetséges folyamatos alternatívája lehet az ikercsigás granuláló használata. Nagy múltú kutatási háttere, a beállítható paramétereinek széleskörű változtatási lehetőségei igen alkalmassá teszik, szemben a szakaszos eljárásnál már megszokott eljárásokkal.

A TDK-munkám legfontosabb célja az volt, hogy egy a portól a tablettáig folyamatos üzemben működő integrált rendszert hozzak létre szárítóberendezés és külön hozzáadott granuláló folyadék használata nélkül. Így sikerült költséghatékonyabbá, rugalmasabbá és energiahatékonyabbá tennem a folyamatos eljárást, ezzel elősegítve a folyamatos eljárások, valamint az ikercsigás granulálók széleskörű elterjedését a gyógyszeriparban.

Polikaprolakton és nem szteroid gyulladáscsökkentők olvadási viselkedésének vizsgálata nagynyomású szén-dioxid közegben

Kurucz Noémi, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kőrösi Márton** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Arany Dóra** PhD-hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A polikaprolaktont implantátumként és hatóanyag-hordozóként is alkalmazzák az orvostechnikában, segítségével lehetőség nyílik kontrollált hatóanyagleadású termékek előállítására, melyekkel gyakran elkerülhetők a dozírozási problémák. [1], [2] Kísérleteim célja a polikaprolakton (PCL) és két nem szteroid tartalmú gyulladáscsökkentő komponens (racém ibuprofen és ketoprofen) olvadásának nyomás- és összetételfüggő vizsgálata volt nagynyomású szén-dioxid közegben. A méréseket nagynyomású látóüveges cella, valamint egy automatizált, nyomáskülönbség mérésén alapuló berendezésen végeztem el.

Vizsgáltam a tiszta polikaprolakton olvadási viselkedését, összehasonlítva a két mérési módszer működését 3 – 20 MPa nyomástartományban. (A két hatóanyag nyomásfüggő olvadási adatai rendelkezésemre álltak.) Ezután az egyedi komponensekből a polimer – gyógyszerhatóanyag rendszerek vizsgálatához a PCL-t és racém ibuprofent vagy ketoprofent közös oldószerben oldottam, majd a mintát szárazra párlással állítottam elő. A mérések során kihasználtam a szén-dioxid szilárd mintába, valamint olvadékba történő beoldódását, ami olvadáspont-csökkenéshez vezetett. A keverékek esetén a méréseket vizuális megfigyelésen alapuló módszerrel, nagynyomású látóüveges cellában végeztem 10 MPa nyomáson. A nyomás állandó értéken tartása mellett feljegyeztem az olvadás kezdetéhez (első olvadáspont) és végéhez (utolsó olvadáspont) tartozó paramétereket, valamint az esetleges további változásokat. Mind a PCL – ibuprofen, mind a PCL – ketoprofen rendszer esetén az összetételtől függetlenül közel állandó hőmérsékleten figyeltem meg az első olvadáspontot. Az összetételfüggő végső olvadási hőmérsékletek mindkét rendszer esetén eutektikus jellegű viselkedésre utalnak. A mérések során nyert termodinamikai adatok a későbbiekben hozzájárulhatnak mikronizálási technikák előzetes üzemi paraméterbecsléséhez. A részecskeképző eljárások segítségével (például PGSS – *Particles from Gas Saturated Solutions*) előállíthatók olyan, mikrométeres tartományba eső (szemcsék, amelyek bizonyos hatóanyag tartalommal rendelkeznek. [3] Ily módon lehetőség nyílik akár kontrollált hatóanyagleadású gyógyszerkészítmények előállítására.

[1] I. Kikic and F. Vecchione, "Supercritical impregnation of polymers," *Curr Opin Solid State Mater Sci*, vol. 7, no. 4–5, pp. 399–405, Aug. 2003, doi: 10.1016/j.cossms.2003.09.001.

[2] M. Champeau, J. M. Thomassin, T. Tassaing, and C. Jérôme, "Drug loading of polymer implants by supercritical CO2 assisted impregnation: A review," Jul. 10, 2015, *Elsevier B.V.* doi: 10.1016/j.jconrel.2015.05.002.

[3] Knez, E. Markočič, M. Leitgeb, M. Primožič, M. Knez Hrnčič, and M. Škerget, "Industrial applications of supercritical fluids: A review," *Energy*, vol. 77, pp. 235–243, Dec. 2014, doi: 10.1016/j.energy.2014.07.044.

Probiotikus baktérium túlélésének javítása kakaópor alapú granulátumban

Szeip Judit, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Szabó Edina** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Nagy Zsombor egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Hirsch Edit tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A funkcionális élelmiszerek, azon belül is a probiotikus készítmények egyre nagyobb hangsúlyt kapnak napjainkban, hiszen a bélflóra egyensúlyának fenntartásával elkerülhető számos megbetegedés. A probiotikus készítményekben gyakran találhatunk különböző *Lactobacillus* törzseket, amik közül kiemelhető a *Lactobacillus acidophilus* és *a Lactobacillus paracasei* fajok, amiket sokszor használnak hasmenés elleni szerekben, továbbá jótékony hatással vannak az immunrendszerre is.

A probiotikus készítmények gyártása összetett feladat, hiszen ezeknek a mikroorganizmusoknak a túlélését sok környezeti stressz befolyásolja mind a gyártás, mind a tárolás során. A megfelelő probiotikus készítmény előállításához ezért szükséges egy olyan gyártási eljárás kidolgozása, amely biztosítja a baktériumok túlélését. Erre megoldás lehet a folyamatos üzemű granulálási technológia, mely kíméletes gyártási lehetőséget biztosít a hőérzékeny biológiai hatóanyagok formulálására.

Kutatómunkám célja elsősorban egy gyermekek számára megfelelő probiotikus funkcionális élelmiszerek formulációjának kidolgozása volt folyamatos granulálás alkalmazásával. Ennek érdekében a formuláció alapjának a kakaóport választottam, így egyszerűen lehet bejuttatni a gyermekek szervezetébe a szükséges probiotikumokat egy kakaó ízű italpor formájában. A formuláció kritikus pontja lehet azonban a baktériumok megfelelő mennyiségének biztosítása, ami a termék hatékonyságát befolyásolhatja. Fő célkitűzésem ebből adódóan az volt, hogy a korábbi kutatásom során megvalósított *Lactobacillus acidophilust* tartalmazó kakaó-granulátum baktériumtartalmát növeljem. Ennek során először célom volt optimalizálni a probiotikum tenyésztését, figyelembe véve a mátrix komponenseinek hatását. Másrészt vizsgáltam különböző stabilizáló komponensek, mint például a mannit, a sovány tejpor és az inulin hatását, melyek elősegíthetik a baktériumok túlélését az élelmiszer-mátrixban, így biztosítva a túlélésüket a gyártási folyamat során. További célom volt, hogy a technológiai megvalósítást átültessem egy másik *Lactobacillus* formulációjára, ezzel igazolva a módszer transzferálhatóságát. Eredményeim hozzájárulhatnak ahhoz, hogy a jövőben innovatív, hatékony, gyermekek számára is könnyen alkalmazható probiotikus formulációk kerülhessenek a piacra.

Cupriavidus fajok poli(hidroxibutirát) termelésének vizsgálata hőmérséklet függvényében

Iványi Adrienn Emese, 10. évf. (középiskolás)

Budapest XIV. Kerületi Teleki Blanka Gimnázium

Témavezető: **Dr. Németh Áron** egyetemi docens, kutatócsoport vezető
BME-Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulens: **Dr. Jarosievitz Beáta** főiskolai tanár
Budapest XIV. Kerületi Teleki Blanka Gimnázium

A műanyagszennyezés évről évre nagyobb problémát jelent. Szerencsére mára már vannak környezetbarát alternatívák, például az általam vizsgált poli(hidroxibutirát), amely a biológiailag lebomló, baktériumok által előállított műanyagok egy csoportjához (poli(hidroxi-alkanát)-ok közé) tartozik. Több, mint 300 prokarióta termel PHB-t táplálkozási stressz hatására. Kutatásomban azt vizsgáltam, hogy a hőmérséklet miképp befolyásolja a baktériumok szaporodását, és ezáltal a poli(hidroxibutirát) termelését. Kétféle baktériumtörzset is vizsgáltam, melyek ugyanazon nemzettségbe (*Cupriavidus*) tartoznak. A kísérletezés során többféle tápközeggel is próbálkoztam, közben ügyeltem a legmegfelelőbb szén-nitrogén arány kialakítására. Méréseim azt mutatták, hogy a hőmérséklet jelentősen befolyásolta mindkét baktériumfaj metabolizmusát. Kutatásom azért fontos, mert segítségével optimalizálni lehetne a hőmérsékletet a *Cupriavidusok* számára, így hatékonyabbá válhatna a poli(hidroxi-butirát) termelése.

A dUTPáz enzim shRNS-alapú csendesítésének és funkcionális hatásainak vizsgálata humán sejtvonalon

Vigh Fanni Beatrix, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Prof. Dr. Vértessy G. Beáta** egyetemi tanár
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulensek: **Dr. Nagy Nikolett** tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK
Tóth Otília PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A dUTPáz enzim katalitikus funkciója révén dUTP-t hidrolizál dUMP-vé és pirofoszfáttá, ezáltal a sejten belüli dUTP/dTTP arányt alacsonyan tartva. Ennek kiemelt szerepe van a genomi integritás fenntartásában, hiszen a DNS-be az uracil be tud épülni a timin bázis helyett. A humán dUTPáz-t a *DUT* gén kódolja, melyről alternatív splicing során négy izoforma, egy mitokondriális, kettő sejtmagi és egy vélhetően citoszolba lokalizálódó keletkezik. Kutatócsoportunk előzetes eredményei és egyéb irodalmi adatok alapján feltételezzük, hogy az enzimnek egy eddig ismeretlen funkciója lehet, melynek elsősorban a sejtosztódás és migráció során van szerepe.

Ezen ismeretlen funkció részletesebb megismerése érdekében HCT116 kolorektális humán rákos sejtvonalon célom volt az enzim csendesítése shRNS-ek által, valamint a sejtmagi DUT-N izoforma overexpressziója stabil és indukálható módon. A létrehozott sejtvonalakban a dUTPáz csendesítés és overexpresszió sikerességét western blot analízissel ellenőriztem.

Munkám során vizsgáltam a genomi uracil szintet dot blot módszer segítségével, amely alapján a dUTPáz csendesített sejtvonal uracil szintje kismértékben megnövekedett. Továbbá a sejtek sejtciklusát vizsgálva azt tapasztaltam, hogy a dUTPáz csendesített sejtek esetén az osztódó, G2/M fázisban található sejtek aránya közel a felére csökkent a vad típusú és a csendesítő kazettát tartalmazó, de nem indukált kontroll sejtekhez képest. A sejtmigrációt követve, azt tapasztaltam, hogy a dUTPáz csendesített sejtek lassabban, míg az enzim sejtmagi formáját overexpresszáló sejtek gyorsabban migráltak, mint a vad típusú és kontroll sejtek. Ez az eredmény alátámasztja azt az irodalmi tényt, mely szerint a dUTPáz enzim expressziója magas a rákos, főleg az áttétet képző sejtekben. A sejtek proliferációját vizsgálva a dUTPáz csendesített sejtek proliferációja csökkent a vad típusú és kontroll sejtekhez képest, ez szintén irodalmi adatokkal egybehangzó eredmény.

Eredményeim arra utalnak, hogy a dUTPáz enzimnek vélhetően van egy, a katalitikus aktivitásától eltérő funkciója, melynek elsősorban a sejtosztódásban és migrációban lehet kiemelt szerepe. Ezen funkció részletesebb megismerését követően a funkció gátlása egy kemoterápiás stratégia lehet, különösen az áttétet képző daganatok esetén.

Hazai szabadtermesztésű cirokfajták változékonysága

Kovács Luca, II. évfolyam (MSc)

Témavezetők: **Dr. Jaksics Edina** egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Juhászné Dr. Szentmiklóssy Marietta Klaudia egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Dr. Tömösközi Sándor tanszékvezető egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A cirok szemtermése jelenleg kevésbé használt alapanyag az élelmiszeriparban annak ellenére, hogy a szakirodalom szerint is több feldolgozóipari területen a kukorica alternatívája is Helyettesítő növényként segítheti a kukoricatermelésben jelentkező, főként a klímaváltozáshoz kapcsolható termesztési problémák megoldását, gluténmentes alapanyagként a gluténérzékenyek és cöliákiások számára is alkalmas élelmiszerek előállítását is lehetővé teszi.

Kutatásom célja a cirok élelmiszer célú felhasználási lehetőségeinek feltárása, a hazai termesztésben elérhető meghatározó fajták összetételének és technológiai tulajdonságainak vizsgálata és összehasonlítása más, jelenleg jellemzően használt gabonafajok szemtermésének adataival. Öt hazai, köztermesztésben lévő fajtából készült lisztet vizsgáltam meg részletesen beltartalmi szempontból, ideértve teljes kiőrlésű, hántolt-szitálatlan és 250 µm átmérőjű szemcseméretnél kisebb fehérliszt frakciókat is. Munkám során vizsgáltam beltartalmi jellemzőket, részletes fehérjeösszetételt, arabinoxilán mennyiséget, méreteloszlást és szubsztituáltságot, keményítő összetételt és méreteloszlást, technoreológiai szempontból víz és olajfelvételt.

A beltartalmi mérések során kis változékonyságot tapasztaltam a nyerszsír, nyersfehérje és hamutartalmi adatok esetén liszttípusonként, nagyobb különbségek mutatkoztak az élelmi rost mennyiségénél. A részletesebb elemzések során hasonlókat tapasztaltam az arabinoxilán mennyiség, szubsztituáltság és méreteloszlás esetén: kis különbségek voltak megfigyelhetőek a minták közt. A fehérjeösszetételi mérések nagy eltérésekre mutattak rá: a vizsgált fajták esetén a kisméretű fehérjék jelentős változékonyságot mutattak gélelektroforetikus és folyadékkromatográfiás vizsgálatok során a fajták között, a folyadékkromatográfia esetén pedig a vizsgált tartomány egészén megfigyelhetőek különbségek. A keményítő-vizsgálatok esetén a búzánál és más gabonáknál használt rutin folyadékkromatográfiás és enzimes módszerek kevésbé voltak alkalmasak a különbségek azonosítására, ezért szükséges a felhasználási területnek megfelelő minősítési módszerek fejlesztése a cirok esetében.

Az eredmények felhasználásával szeretném folytatni a fajták közti különbségek feltárását reológiai és technológiai tulajdonságok esetén is, valamint kalibrált módszerrel bővíteni a fehérjék vizsgálatát, hogy részletesebb képet kapjak arról, milyen mérettartományok esetén jelentkeznek a legnagyobb különbségek. Hosszabb távon érdemesnek tartom külföldi fajták bevonásával a cirok nemzetközi változékonyságát is megvizsgálni.

Munkámhoz a szegedi Gabonakutató Nonprofit Kft. és az Agroszemek Kft. biztosított alapanyagot. A kutatást a Varga József Alapítvány Startup Programja, valamint a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kara támogatta. A mérések a BME-EGA-02-TKP2021 projekt része, amelyet Magyarország Innovációs és Technológiai Minisztériuma támogatott a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból.

Timidilát-szintáz gátlók hatására indukált citozin-dezamináció vizsgálata vastagbélrák sejtvonalon

Lois Izabella, IV. évf. (BSc)
Roza Petra, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Békési Angéla** egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulensek: **Holub Eszter** PhD-hallgató
ELTE TTK Biológia Doktori Iskola
Szajkó Milda Blanka PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A timidilát-bioszintézis gátlása régóta alkalmazott rákterápiás stratégia többek között bélrák kezelésére. A timidilát-szintáz inhibíciójával a sejtbeli dUTP/dTTP arány hatékonyan növelhető, ami a DNS-szintézis során nagymértékű timin helyetti uracil beépülést eredményez, ami a hibajavító útvonalak fokozott működése révén sejthalálhoz vezethet. Ez elsősorban a gyorsan osztódó sejteket, például a rákos sejteket érinti. A közelmúltban több kemoterápiás szerről kimutatták, hogy hatásukra DNS-citozin-dezamináz enzimek aktiválódhatnak, amik potenciálisan veszélyt jelenthetnek a genomra. A kutatócsoportunkban genomszekvenálással kimutatták, hogy két, a klinikumban elterjedt timidilát-szintáz-gátló közül a nukleotid analóg 5-fluoro-2'-dezoxiuridin (5FdUR) kezelés során megemelkedik a genomi DNS-ben detektálható C□T átmenetek aránya, míg az antifolát típusú raltitrexed (RTX) hatására ilyen mutációs gyakoriság növekedés nem volt tapasztalható. A mutációs spektrumok alapján a jelenség hátterében az APOBEC3 DNS-citozin-dezamináz enzimcsalád egyes tagjai állhatnak, amiknek megemelkedett génexpressziós szintjét már qPCR segítségével sikerült igazolni.

Jelen munkában célul tűztük ki a megnövekedett genomi citozin-dezaminációs gyakoriság független módszerrel való kimutatását. Ehhez a kutatócsoportunkban korábban részleges sikerrel alkalmazott 3D-PCR technikát kívántuk továbbfejleszteni, ami lehetőséget nyújthat az indukált mutációs folyamatok idő- és dózisfüggésének hatékonyabb és olcsóbb vizsgálatára.

A dUTPáz szerepének vizsgálata a centroszóma dinamikában

Golács Zita Réka, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Vértessy G. Beáta** egyetemi tanár, az MTA levelező tagja
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulensek: **Tóth Otília** PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Dr. Nagy Nikolett tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK

A dUTPáz enzim fontos szerepet játszik a genomi integritás megőrzésében azáltal, hogy hidrolizálja a dUTP-t dUMP-vé, megelőzve az uracil beépülését a DNS-be. Az utóbbi évek kutatásai azonban rámutattak, hogy a dUTPáz szerepe nem feltétlenül csak a nukleotid-anyagcserére korlátozódik, hanem valószínűsíthetően további szereppel is rendelkezik. Korábbi adatok és élesztő kéthibrid vizsgálatok alapján felmerült, hogy a dUTPáz kapcsolódhat a sejtosztódás során fontos centroszómális fehérjékhez, ezért kutatásom célja az enzim potenciális új szerepének, különösen a centroszómális lokalizációjának és fehérjekapcsolatainak vizsgálata volt humán sejtekben.

A vizsgálatok során humán HCT116 sejtvonalat alkalmaztam, és immunfluoreszcens festéssel tanulmányoztam a dUTPáz sejten belüli eloszlását. A γ-tubulin, ODF2 és miomegalin centroszómális markerekkel végzett kettős festések alapján a dUTPáz a centroszómák környékén koncentrálódott, mely eloszlás dinamikusan változott a sejtosztódás során, és főként interfázisban és telofázisban volt detektálható a centroszómák környékén.

A lehetséges kölcsönható partnerek azonosítására ko-immunoprecipitációs kísérleteket és azt követő Western blot analízist végeztem. Az ODF2 immunprecipitációjával a dUTPáz jelenléte világosan kimutatható volt. Ez az eredmény összhangban van az immunfluoreszcens festések során tapasztalt kolokalizációval, és arra utal, hogy a dUTPáz valószínűleg a centriólumok disztális régiójához kapcsolódik, ahol az ODF2 is megtalálható.

Eredményeim összességében alátámasztják, hogy a dUTPáz a sejtosztódás során dinamikus, centroszómához köthető eloszlást mutat, és valószínűleg részt vesz a centroszómák szerkezeti integritásának és funkcionális működésének fenntartásában. A kísérletek hozzájárulnak a dUTPáz új sejtfunkcióinak megértéséhez, és alapot teremthetnek a sejtosztódás és a genomstabilitás összefüggéseinek további kutatásához.

Szárazúti borsófehérje és -keményítő frakciók átfogó jellemzése, termékfejlesztés lehetősége

Kováts Fanni Virág, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Jaksics Edina** egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Dr. Tömösközi Sándor tanszékvezető, egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az utóbbi években megnőtt az igény az alternatív fehérjeforrások fogyasztására az állati eredetű hús és tejtermékekkel szemben, mivel ez sok szempontból fentarthatóbb élelmiszerlánc kialakítását teszi lehetővé. Ebben a borsónak jelentős szerepe lehet, mivel viszonylag könnyen termeszthető, aminosav összetétele kedvező, nem GMO-növény, és gluténmentes, ezért a cöliákiában szenvedő fogyasztóknak is jó tápanyagforrást jelenthet. Ugyanakkor technológiai tulajdonságai alulmaradnak a szójáéhoz képest, és még kevés lehetséges felhasználási módja ismert. Húspótló készítményekben már alkalmazzák, illetve fehérjedúsítás céljából, de kifejezetten borsófehérjéből vagy -keményítőből még kevés terméket hoznak létre. Kutatómunkám egy jelenleg beüzemelés alatt álló szárazúti szeparációs technológiából származó kísérleti fehérdús és keményítődús frakciók jellemzése és felhasználási lehetőségeinek vizsgálata, különös tekintettel száraztésztakészítés lehetőségeire.
Kutatásom során a használt borsófehérje és -keményítő koncentrátumok beltartalmát (nyersfehérje- és hamutartalmát), funkcionális tulajdonságait (vízkötőképesség, olajkötőképesség), ezek stabilitását vizsgáltam és hasonlítottam össze más gyártó termékeivel. Ezt követően a borsókeményítő és -fehérje alapú száraztészta laboratóriumi előállítási és minősítési módszertanán dolgoztam, majd a kidolgozott módszerrel vizsgáltam a különböző alapanyagból készült tészták tulajdonságait, mint pl. állag, állomány, keménység, érzékszervi jellemzők.
A vizsgált borsókeményítő és -fehérje koncentrátumok nyersfehérje és hamutartalmát összevetve más gyártó termékével, azt tapasztaltuk, hogy a hamutartalmuk hasonló, míg a fehérjetartalom esetében a más gyárból származó keményítőnél alacsonyabb értéket mértünk. A víz- és olajkötőképességben nem találtunk jelentős eltérést az eltérő gyárból származó minták között. Ezután kisipari tésztagéppel tésztát készítettem a keményítő és fehérje frakcióból, melyet Texture Profile Analyzer és a főzési tulajdonságok alapján minősítettem. Elmondható, hogy sikerült ismételhető módszert kidolgoznom a tésztakészítésre és minősítésre. Kétféle keményítőből és két külön napon gyártott fehérjekoncentrátumból készítettem tésztákat. A fehérjetészták között nem tapasztaltam jelentős eltérést, de a keményítő koncentrátumból készültek között minden paraméter tekintetében jelentős különbség adódott. Vizsgáltam még az újramelegítés hatását a tésztákra két melegítés mód mellett. Melegítési módtól függetlenül csökkent a tészták keménysége, gumissága és rágóssága, de tapadósabbak lettek. Legutoljára érzékszervi vizsgálatot végeztem, ahol az általam készített keményítő tésztát hasonlítottam össze kereskedelmi forgalomban kapható borsótésztával, illetve a fehérjetésztáimmal. Összességében kedvezőbbnek bizonyultak a saját tésztáim, mint a bolti.
A munka folytatásaként érdemes lehet a megbízó gyártási technológiájának stabilitásának vizsgálatát is elvégezni. Továbbá az alapanyagok és tészták részletes vizsgálatát is tervezem elvégezni, hogy megértsük, hogy az adott tulajdonságok mögött milyen makromolekuláris átalakulások állhatnak.

A kutatást a Varga József Alapítvány Startup Programja, valamint a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kara támogatta. A mérések a BME-EGA-02-TKP2021 projekt része, amelyet Magyarország Innovációs és Technológiai Minisztériuma támogatott a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból

A *Cupriavidus basiliensis* biopolimer termelésének vizsgálata

Háry Laura, 12. évf. (középiskolás)

Zalaegerszegi Zrínyi Miklós Gimnázium

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

A kutatás célja a biológiailag lebomló polimerek előállítására alkalmas mikroorganizmusok fermentációs lehetőségeinek vizsgálata volt, különös tekintettel a *Cupriavidus basilensis* B-2487 törzsre, amely a széles körben tanulmányozott *Cupriavidus necator* közeli rokona, és ennek megfelelően került a vizsgálat középpontjába. A mikrobiális biopolimerek, különösen a polihidroxialkanoátok (PHA-k), ígéretes alternatívát jelentenek a fosszilis alapú polimerekkel szemben, ezért a baktériumok növekedési és termékképzési dinamikájának feltérképezése alapvető jelentőségű a fenntartható ipari alkalmazások szempontjából. A vizsgálat során a költséghatékonyság jegyében különböző szervetlen tápközegek kerültek kipróbálásra a *C. basilensis* inokulálására. Az abszorbancia-idősor alapján a vizsgált a *Cupriavidus basilensis* B-2487 törzs az inokulálást követő első héten mérsékelt növekedést produkált, amely az abszorbanciaértékek emelkedésében volt kimutatható. Ezt követően azonban az értékek csökkenése és stagnálása jelezte, hogy a vizsgált fermentációs feltételek hosszabb távon nem támogatták a biomassza-akkumulációt. A BacTrac rendszer által rögzített impedanciaváltozások szintén korlátozott aktivitásra utaltak, ugyanakkor a kezdeti növekedés igazolta a törzs potenciális alkalmasságát biopolimer-termelésre megfelelő körülmények között. A kísérlet időtartama és a vizsgálati minta korlátozott száma nem tette lehetővé a hosszú távú növekedési trendek és a metabolikus aktivitás részletes statisztikai értékelését. Az eredmények rámutatnak arra, hogy a *C. basilensis* B-2487 törzs fermentációs környezetének optimalizálása elengedhetetlen a biopolimerek ipari szintű előállításához. A tápközeg összetétele, a fermentációs időtartam és a technológiai paraméterek kulcsszerepet játszanak a növekedési dinamika és a PHA-termelés hatékonyságában. Az elvégzett kutatásújdonsága, hogy laboratóriumi körülmények között, több, a szakirodalomban erre a célra még nem közölt technológiai rendszerben követte a *C. basilensis* B-2487 növekedését, és bemutatta a különböző környezetek közötti eltéréseket. Az eredmények hozzájárulnak a biopolimer-termeléshez kapcsolódó mikrobiális folyamatok mélyebb megértéséhez, és alapot nyújtanak a jövőbeli fermentációs stratégiák kidolgozásához.

Új potenciális kovalens ortosztérikus SHP2-inhibitorok szintézise és vizsgálata

Bánrévi Zoltán, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Ábrányi-Balogh Péter,** c. egyetemi docens, tudományos főmunkatárs
BME VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék
HUN-REN TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport
Csorba Noémi PhD-hallgató
HUN-REN TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

A tirozin-foszfatáz SHP2 központi szerepet játszik számos sejten belüli jelátviteli útvonal szabályozásában. Fokozott aktivitása tumorképződéshez és áttétek kialakulásához vezethet, így ígéretes célpontként merült fel a daganatos megbetegedések kezelése során. [1] Az enzim funkciójának hatékony blokkolása megvalósítható ortosztérikus inhibitorokkal, melyek szerkezetük révén képesek kiszorítani az endogén ligandumot, ezáltal közvetlenül gátolva az SHP2 defoszforilációs aktivitását. [2] Jelenleg is zajlanak kutatások új ortosztérikus inhibitor molekulák fejlesztésére, amelyek közül egyes azaindol-származékok kiemelkedő hatékonyságot mutattak. [3] Kutatócsoportunk hipotézise szerint ezeket a molekulákat megfelelő elektrofil kötőelemekkel felszerelve az ortosztérikus kötőhelyen található ciszteinhez történő kovalens kapcsolódás révén további hatékonyságnövekedés érhető el.

Munkám során elsőként az irodalomban már ismert, azaindol típusú, karbonsav funkciót tartalmazó, ortosztérikus inhibitor vegyület ötlépéses szintézisének megvalósítását tűztem ki célul. Ez a vegyület referenciaként szolgálhat a további biológiai vizsgálatokhoz. Több szintézislépés esetében eredményesen növeltem a hatékonyságot az irodalomban leírt eljáráshoz képest, a reakciókörülmények, illetve a feldolgozási eljárás változtatásával. Ezt követően további célom volt olyan származékok előállítása, amelyek kovalens mechanizmus révén képesek kötődni az SHP2 fehérje ortosztérikus kötőhelyéhez. Ehhez az előző vegyülethez szerkezetileg hasonló, amin funkciót tartalmazó származékhoz acilezési reakciók alkalmazásával különböző elektrofil kötőelemeket tartalmazó csoportokat kapcsoltam, így sikeresen előállítottam három, az irodalomban eddig nem ismert vegyületet, amelyek ígéretes kovalens inhibitorokként szolgálhatnak. Végezetül *in vitro* biológai vizsgálatban meghatároztuk a vegyületek biológiai aktivitását, amely során igazoltuk, hogy akrilamid kötőelem kapcsolásával sikerült az irodalmi inhibitorszármazék hatékonyságát számottevően megnövelni.

Jövőbeli célunk az előállított vegyületek pontos kötődési helyének vizsgálata a fehérjén, HPLC–MS/MS-alapú emésztéses vizsgálatban. Igazolt hatásmechanizmus esetén az általunk szintetizált vegyületek új áttörést jelenthetnek az SHP2 fehérje inhibitorainak fejlesztésében és hozzájárulhatnak a fehérje gátlásának mélyebb megértéséhez, valamint annak potenciális rákterápiás alkalmazásához.

[1] M. D. Asmamaw, X. J. Shi, L. R. Zhang, and H. M. Liu, "A comprehensive review of SHP2 and its role in cancer," *Cell. Oncol.*, **2022**, *45*(5), 729–753,

[2] Y. Song, S. Wang, M. Zhao, X. Yang, and B. Yu, "Strategies Targeting Protein Tyrosine Phosphatase SHP2 for Cancer Therapy," *J. Med. Chem.*, **2022**, *65*(4), 3066–3079,

[3] Y. Mostinski et al., "From Pyrazolones to Azaindoles: Evolution of Active-Site SHP2 Inhibitors Based on Scaffold Hopping and Bioisosteric Replacement," *J. Med. Chem.*, **2020**, *63*(23), 14780–14804,

Várhatóan antiproliferatív hatású vindolin- és krizinszármazékok előállítása és vizsgálata

Motuz Benjámin, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Keglevich Péter** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék
Konzulensek: **Dr. Hazai László** egyetemi magántanár
BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék
Halmai Mónika PhD-hallgató
BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék

A daganatos megbetegedések világszerte az egyik vezető haláloknak számítanak, ezért a rák elleni küzdelem napjaink egyik legfontosabb orvosi és gyógyszerkutatási területe. A célzott daganatellenes terápiák fejlesztése során kiemelt szerepet kapnak azok a természetes eredetű vegyületek, amelyek sejtosztódást gátló, citosztatikus hatással rendelkeznek. Ezen molekulák módosításával és új szerkezeti hibridek előállításával lehetőség nyílik hatékonyabb és szelektívebb gyógyszerjelöltek kifejlesztésére.

Dolgozatom célja olyan hibrid molekulák előállítása, amelyek sejtosztódást gátló hatással rendelkezhetnek, és szerkezetükben vindolin-, illetve krizinszármazékokat tartalmaznak. A vindolin egy *Vinca*-alkaloid, míg a krizin egy flavonoid típusú természetes vegyület; mindkettő bizonyított biológiai aktivitással rendelkezik. A szintézisek során különféle farmakofórokat kapcsoltam ezekhez az alapvázakhoz, főként piperazinszármazékokat, amelyek közül az 1-(4-trifluormetilbenzil)piperazint, az 1-bisz(4-fluorfenil)metilpiperazint, az 1-(4-fluorbenzil)-piperazint, az *N*-metilpiperazint, illetve a metilszulfonilpiperazint alkalmaztam krizinszármazékok előállítására. Ezen túlmenően egy krizinszármazékból piperazin segítségével dimert is képeztem.

A vindolinszármazékokhoz különböző farmakofórokat, így fahéjsavat, valamint aminosavakat – metionin-metilésztert és szelenometionin-metilésztert – kapcsoltam. A fahéjsavszármazékokat különböző pozíciókban is beépítettem a molekulába. A kapcsolások előfeltételeként minden esetben megfelelő funkciós csoportokat alakítottam ki, amelyek lehetővé tették a linker kialakítását, vagy – bizonyos esetekben – a közvetlen kapcsolást a kiindulási molekula és a farmakofór között.

A szintézisek preparatív szerves kémiai módszerekkel történtek, a reakciókat feldolgozás és tisztítás követte. A kapott vegyületek szerkezetét a Richter Gedeon Nyrt. szakemberei spektroszkópiai módszerekkel (elsősorban NMR-rel) ellenőrzik. Szükség esetén további tisztítást végzek. A szintetizált vegyületek biológiai aktivitásának vizsgálatát az SZTE együttműködésével végzik.

Kritikus nyersanyagok biológiai kioldása görög vörösiszapból

Budai Anna Brigitta, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Feigl Viktória** egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A vörösiszap (bauxit maradék) a timföldgyártás során keletkező hulladék, amely kritikus nyersanyagokat tartalmaz, azaz olyan természetes vegyi elemeket és ásványokat, amelyek gazdaságunk és társadalmunk számára elengedhetetlenek, ezenkívül nagy a kockázata az ellátás megszakadásának. Számos gazdasági szempontból fontos fémkomponens található meg benne, például vas, alumínium, titán, vanádium és gallium, amelyek hatékony visszanyerése kihívást jelent. A vörösiszap emellett ritkaföldfémeket is tartalmazhat, többek között szkandiumot, lantánt, cériumot, neodímiumot, szamáriumot, ittriumot, gadolíniumot és diszpróziumot.

Kutatásom célja a vörösiszapból a kritikus nyersanyagok biológiai kioldását megvalósító technológia fejlesztése. Négy kísérletet végeztem fonalas gombák technológiai alkalmazhatóságának vizsgálata céljából. Ezen gombák szerves savak, pl. citromsav, oxálsav termelésével képesek a fémek biológiai kioldására. Vizsgálni kívántam, hogy mi az a legmagasabb görög vörösiszap koncentráció, amit még tolerálni tud az *Aspergillus niger* var. *phoenicis* törzs. Továbbá dolgozatom egyik kérdése volt, hogy működőképes-e a vörösiszapból való fémkioldás, ha a mikroorganizmust nem szacharózos tápoldatban tenyésztjük, hanem söripari hulladékot használunk tápanyagforrásként.

A kísérletek során 1%, 10%, 15% és 20%-os vörösiszap szuszpenziót teszteltem rázatott lombikos kísérletekben. A folyamatok nyomon követésére pH és vezetőképesség mérést, mikroszkópos vizsgálatokat és elemtartalom meghatározást (ICP-MS/MS) használtam.

Az eredmények azt mutatják, hogy a gomba az összes tesztelt vörösiszap koncentrációjú oldatban képes savtermelésre, a pH csökkent a vörösiszapot és *Aspergillus niger*t tartalmazó szacharózos tápoldatokban tenyésztett mintákban. Számos elem koncentrációja megnőtt a mintákban a kontrollhoz képest, többek között az alumínium, a titán, a vas, a szkandium, a gallium, az ittrium, a cirkónium, a lantán, a cérium, a neodímium, a szamárium, a gadolínium és a diszprózium esetében volt megfigyelhető biológiai kioldás.

A kioldási maradék ökotoxicitását *Aliivibrio fischeri* biolumineszcencia teszttel vizsgáltam. Az eredmények alapján kiderült, hogy a technológia végére nem ajánlott egy vizes mosási lépést beiktatni, mivel a kioldási maradék toxicitása nem csökken jelentős mértékben, ellenben a mosóvíz toxicitása problémát okozhat.

Úgy gondolom, kísérleteimmel hozzájárultam egy a vörösiszapot újrahasznosító környezetbarát biotechnológiai eljárás kifejlesztéséhez és a kritikus nyersanyagok ellátási kockázatának csökkentéséhez.

A dUTPáz eukarióta sejten belüli kölcsönhatásainak kimutatása

Juhász András János, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Vértessy G. Beáta** egyetemi tanár, az MTA levelező tagja
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulens: **Perey-Simon Viktória Berta** PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az uracil amely alapvetően egy RNS bázis, előfordulhat a DNS-ben is, általában hibaként. Két módon jelenhet meg a genomban, az egyik ilyen útvonal a citozin enzimatikus vagy spontán dezaminációja. A dezaminació által történő uracil beépülés mutációt eredményezhet ezáltal akár tumoros elváltozásokat vagy sejthalált is indukálva. A másik lehetőség, hogy a replikáció során a DNS polimerázok építik be, mivel azok nem képesek különbséget tenni a timin és az uracil között. A megfelelő dNTP-k (dUTP/dTTP) relatív szintje határozza meg a beépülési arányokat. A dUTPáz enzim, ami megtalálható majdnem minden élőlényben, a dUTP-t hidrolizálja dUMP-re és pirofoszfátra. Ezzel hatékonyan csökkentve a dUTP koncentrációját a sejtben, hogy az ne kerülhessen be a DNS-be, és kiindulási anyagot biztosít a dTTP bioszintéziséhez, ezzel a kettős hatással megfordítva a dUTP:dTTP arányt. A dUTPáz potenciális célpont lehet rákellenes, vírusellenes, antibakteriális és malériaellenes terápiákban [1]. Kutatások rámutattak arra, hogy a klasszikus enzim aktivitás mellet elláthat más, szabályzó funkciókat is, kölcsönhathat fehérjékkel [2].

Kutatásom célja, hogy a dUTPáz lehetséges fehérje kölcsönható partnereit kimutassam eukarióta sejtekben. Ennek keretében a cenexin fehérjét vizsgáltuk. A cenexin az odf2 (külső sűrű rost – outer dense fiber) fehérjének az egyik hosszabb izoformája, amely egy szokatlan C-terminális kiterjedéssel rendelkezik. Az odf2 a spermiumfarok rostjainak fő alkotóeleme, míg a cenexin a bazális testekhez lokalizálódik. Kritikus szerepet tölt be a ciliogenezisben a C-terminális kiterjesztése révén, amely speciális képességet biztosít az elsődleges ciliumok összeszerelődésének közvetítésére. Ezen funkció mellett más sejtfolyamatokban is szerepet játszhat a sejtciklus során [3].

A vizsgálathoz bimolekuláris fluoreszcencia komlementáció (BiFC) módszert használunk. Elve, hogy egy fluoreszcens fehérjét két nem fluoreszkáló részre osztunk, és ezeket a fragmenseket fuzionáltatjuk a feltételezett kölcsönható partnerekre. Ha a kölcsönhatás révén a fragmensek elég közel kerülnek egymáshoz, azok képesek asszociálódni, ezzel visszaállítva a fluoreszcenciát, amely konfokális mikroszkóppal detektálható [4].

Munkám során megfelelő fuzionált fehérje konstruktokat és negatív kontrollt terveztem, majd a megfelelő kísérleti elrendezés megválasztása és optimálása után transzfekcióval HCT116 sejtekbe juttattam és az eredményeket konfokális mikroszkóppal vizsgáltam.

[1] Vértessy, B. G., & Tóth, J. (2008). Keeping Uracil Out of DNA: Physiological Role, Structure and Catalytic Mechanism of dUTPases. *Accounts of Chemical Research*, 42(1), 97-106.

[2] Ariza, M. E., Cox, B., Martinez, B., Mena-Palomo, I., Zarate, G. J., & Williams, M. V. (2022). Viral dUTPases: Modulators of Innate Immunity. *Biomolecules*, 12(2), 227.

[3] Chang, J., Seo, S., Lee, K., Nagashima, K., Bang, J., Kim, B., Erikson, R. L., Lee, K.-W., Lee, H., Park, J.-E., & Lee, K. S. (2013). Essential role of Cenexin1, but not Odf2, in ciliogenesis. *Cell Cycle*, 12(4), 655-662.

[4] Kerppola, T. K. (2006). Design and implementation of bimolecular fluorescence complementation (BiFC) assays for the visualization of protein interactions in living cells. *Nature Protocols*, 1(3), 1278-1286.

Gyapjú mint lehetőség olajszennyezett vizek tisztítására

Nyerki Botond, 12. évf. (középiskolás)
Szekszárdi I. Béla Gimnázium

Témavezető: **Barocsai Zoltán** középiskolai tanár
Szekszárdi I. Béla Gimnázium

Bevezetés

Az autómosók működése során az autók tisztítása közben olaj kerülhet a használt vízbe, amely így szennyezi a vizeket. Ebből adódóan célunknak azt tűztűk ki, hogy megvizsgáljuk a gyapjú olaj és vízmegtartó kapacitását és teszteljük olajszűrő eszközként mivel az olajszennyezettség nem csak a felszín feletti, hanem a felszín alatti vizeinkre is veszélyt jelent. Hipotézisünk szerint a gyapjú magas olajmegtartó kapacitással rendelkezik illetve gyapjú felhasználása különösen aktuális, mivel Magyarországon évente több ezer tonna keletkezik belőle, és jelentős része nem kerül hasznosításra. A gazdák számára ez gyakran hulladékot jelent, így kutatásunk nemcsak környezetvédelmi, hanem gazdasági szempontból is indokolt.

Módszerek

A gyapjút egy hazai kistermelőtől szereztük be, majd megtisztítottuk a szennyeződésektől, kimostuk, kiszárítottuk. Ezt követően CT-géppel vizsgáltuk a belső szerkezetét, hogy megfigyelhessük, miként szívja fel az olajat. Meghatároztuk a gyapjú olaj- és vízmegtartó képességét, majd áramló közegben is teszteltük. Egy autómosóban TPH-s módszerrel mértük a kifolyó víz olajtartalmát. Ezután létrehoztunk egy gyapjúszűrőt, amelynek vázát a SketchUp 3D-s tervezőprogram segítségével készítettük el. A szűrőt az autómosóba építettük be. Mintákat a beépítés előtt és után is négyszer vettünk három különböző ponton, így összesen 24 vízmintával dolgoztunk.

Eredmények

A CT-felvételeken jól megfigyelhető, hogy a gyapjú a vizet egyenletesen, míg az olajat koncentrált tömbökben szívja fel. Az olajmegtartó kapacitása kb. háromszorosa volt a vízének, vagyis kiválóan alkalmas az olaj eltávolítására. Áramló víz esetén is jelentősen csökkent az olajtartalom. 2024 decemberében történt a gyapjúszűrő beépítése és a mérések elvégzése. Az eredetileg alkalmazott szintetikus szűrő csupán az olaj körülbelül felét szűrte ki. A mi, kisebb méretű gyapjúszűrőnk a maradék szennyeződés kétharmadát is eltávolította, így végül az olajszennyezésnek csupán harmada jutott tovább a csatornahálózatba.

Következtetés

A gyapjú természetes és fenntartható szűrőanyagként ígéretes alternatívát kínál a szintetikus szűrőkkel szemben. Hatékonyan köti meg az olajat, környezetkímélő módon újrahasznosítható, és gazdasági értékkel is bír. A szennyezett gyapjú energetikai célra vagy más körforgásos megoldással újra felhasználható, így hozzájárulhat a hulladékcsökkentéshez és a fenntartható vízkezeléshez.

Vízvisszatartás- és talajerózió-csökkentés talajjavító anyagokkal

Sánta Benedek, **Frei Márton**, 12. évf. (középiskolás)
Szekszárdi I. Béla Gimnázium

Témavezető: **Barocsai Zoltán** középiskolai tanár
Szekszárdi I. Béla Gimnázium

Bevezetés

Az elmúlt évtizedek időjárási változásai jelentős hatással voltak a mezőgazdasági termelésre. A csapadékviszonyok szélsőséges változása és a hirtelenlen lezúduló villámárvizek gyakorisága fokozza az eróziót, az ezt követő hosszú aszályos időszakok pedig nagymértékben csökkentik a talaj nedvességtartalmát. Ez a növekvő összetett környezeti veszély globális probléma, amellyel számos országnak szembe kell néznie.

Cél, hipotézis

Az otthonunk környékén gyűjtött talajminták, az általunk készített talajkeverékek, eróziós kisérletek és saját termékünk tesztelésével szeretnénk következtetéseket levonni és ajánlásokat tenni az erózió csökkentése és a vízvisszatartás javítása érdekében. Hipotézisünk, hogy saját egyedi és innovatív termékünkkel csökkenthetjük a talajeróziót és javíthatjuk a talajok vízmegtartó képességét, és ezzel jelentős pozitív hatást gyakorolhatunk Magyarország eróziós problémáira és vízháztartási negatívumaira.

Anyag és módszer

Kutatásunkban az elmúlt több mint 40 év meteorológiai adatait elemeztük Szekszárdon, majd az MSZ 21470 szerint gyűjtöttünk talajmintákat, talajjavító anyagokat (perlit, alginit, zeolit, komposzt, tőzeg, szarvasmarhatrágya) és talajkeverékeket vizsgáltunk textúra, humusz, pH és vízmegtartó képesség szempontjából. A talajkeverékek vízmegtartó képességét 120 cserépben vizsgáltuk, amelyekben 13 héten keresztül búzát termesztettünk. Az erózió modellezésére az USLE egyenletet használtuk. A talajkeverékek erózióra gyakorolt hatását saját készítésű mikrokozmoszban vizsgáltuk. Majd innovatív elemként hőkezelt faforgácsot használtunk, amit vízmegtartás szempontjából elemeztünk.

Eredmények

A csapadék szélsőségessé válását a megfigyeléseink is megerősítették. A vizsgált talajok textúrája (iszap, iszapos vályog), ami talajjavító anyagok hatására a homokfrakció felé tolódott el. A vízvisszatartás a talajkeverékekkel nőtt, a pH a lúgos irányba tolódott el. A talajkeverékek és a talajtakarási módszerek hatékonyabban tartották vissza a vizet, mint az alaptalaj. Az erózió mértéke az USLE alapján modellezhető volt. A mikrokozmoszban végzett áteresztőképességi és talajeróziós vizsgálatok bizonyították, hogy a talajkeverékeink képesek az erózió megfékezésére és a vízvisszatartás javítására.

Következtetések

Az általunk kifejlesztett talajkeverékek csökkenthetik a talajeróziót és javíthatják a talaj vízvisszatartását. A talajkeverékek, a talajtakarás, a hőkezelt fa és faforgács együttes használata jelentős vízvisszatartást biztosíthat és csökkentheti az eróziót.

Ciklodextrinnel funkcionalizált mikrotálcák enantiomerszűrési eljárásokhoz

Nádasdi Zsófia, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Golcs Ádám** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Dr. Huszthy Péter** Professor Emeritus, az MTA rendes tagja
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A mikrotálca-alapú, nagy áteresztőképességű kísérleti platformok napjaink vegyipari gyakorlatának sarokkövei, amelyeket világszerte széleskörben, napi szinten alkalmaznak. Jelen dolgozatban bemutatom β-ciklodextrin szelektorok különböző kovalens immobilizálási módszereit egy kereskedelmi forgalomban kapható, szabványos, 96 cellás szűrőtálca nanopórusos PVDF-membránjára, amely így enantioszeparációs eszközként nanomoláris léptékű alkalmazhatóságot és kiváló integrálhatóságot biztosít az automatizált munkafolyamatokba. Az elválasztóképességet kismolekulás, biogén racém vegyületek víz-DMSO oldataiban teszteltem. Az elválasztás alapját a preferált izomer sztereoszelektív visszatartása adta a passzív diffúzióval vezérelt membrántranszport során, amelyet molekulamodellezési vizsgálatok is alátámasztottak. Az új megközelítés lehetővé teszi az izomerkeverékek enantiodúsítását a könyvtárszintézisek során és javíthatja a korai fázisú, nagy áteresztőképességű vegyületszűrések megbízhatóságát. Emellett az új megközelítés energiagazdaságosság és áteresztőképesség tekintetében is felülmúlja a hagyományos alternatívákat.

Digitális ikerpár a gyógyszeripari fluid granulálásban: tudomány- és mesterséges intelligencia-alapú modellezési módszerek összehasonlítása

Takács Orsolya, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Nagy Brigitta** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Dr. Gyürkés Martin** analitikai fejlesztő
Egis Gyógyszergyár Zrt.

Az Ipar 4.0-hoz kapcsolódó digitalizációs törekvések a gyógyszeriparban egyre jelentősebb szerepet töltenek be. Ezek kiegészítik és támogatják a Tervezett minőség (QbD) elvét, amely szerint a termékminőséget a fejlesztési és gyártási fázisok során szükséges integrálni a folyamatokba. A fluid granulálás a szilárd gyógyszerformák gyártásának egyik kulcslépése, amely alapvetően befolyásolja a tabletták stabilitását és a hatóanyagtartalom egységességét. A folyamat monitorozására a modellezés ígéretes módszer lehet, amely megvalósítható empirikus és mechanisztikus megközelítéssel is. Ez alapot teremt soft szenzorok fejlesztéséhez, amelyek könnyen mérhető jellemzőkből kritikus, ám nehezen mérhető folyamatparaméterekre tudnak becslést adni, továbbá támogatja a digitális ikerpárok létrehozását. Ezáltal a modellezés elősegíti a kritikus folyamatparaméterek azonosítását, valamint a folyamat optimalizálását és szabályozását.

Munkám célja a fluid granulálás modellezése, két különböző modellezési megközelítés összehasonlítása, valamint digitális ikerpárként való alkalmazhatóságuk vizsgálata. A modellek bemeneti adatkészlete ipari méretű fluid granulálás gyártási tételeiből származó szenzoradatokból áll. Empirikus megközelítésként mesterséges neurális hálózatot (ANN) fejlesztettem a granulátum nedvességtartalmának becslésére, amely soft szenzorként is alkalmazható, ezáltal elősegítheti a kiegészítő analitikai módszerek – például közeli infravörös spektroszkópia (NIR) – elhagyását. A hő- és anyagmérlegeken alapuló mechanisztikus modell a granulátum hőmérsékletére és nedvességtartalmára, valamint a kilépő levegő ugyanezen paramétereire ad becslést, amely különösen fontos hőérzékeny, hatóanyagok feldolgozásakor. A modellezés ezen megközelítése fizikai-kémiai alapú összefüggései révén a szimulált folyamat pontosabb megértéséhez is hozzájárul.

A becsült termékjellemzők mindkét modell esetében jól illeszkedtek a mért értékekre. A mechanisztikus modell a granulátum hőmérsékletének és nedvességtartalmának alakulását a várt dinamikával összhangban szimulálta. Az ANN-alapú modell esetében a tanító és a validáló halmaz eredményei azt mutatták, hogy a modell nem csupán a tanító adatokra illeszkedik jól, hanem új adatkészlettel is megbízhatóan működik. Az eredmények alátámasztják, hogy a modellezés hatékony eszközül szolgálhat a folyamatparaméterek optimalizálásában, alkalmazásával biztosítható a stabil termékminőség.

Képelemzés alapú szoftverfejlesztés hatóanyagok gócképződési folyamatának vizsgálatára

Palló Barnabás, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Pataki Hajnalka** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Stoffán György Nimród** PhD-hallgató,
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Munkám során aktív gyógyszerhatóanyagok (famotidin és irbezartán) kristálykiválásához szükséges indukciós idejét vizsgáltam, egy általam fejlesztett kamera-alapú módszerrel és szoftverrel, különböző folyamatparaméterek függvényében (túltelítés, formulálási segédanyag jelenléte, felmelegítési hőmérséklet). Ezen kísérleti körülmények közvetlen hatással vannak a gócképződés kimenetelére, valamint az előállított kristályos hatóanyag feldolgozhatóságát és biohasznosulását meghatározó fizikai tulajdonságaira.

Az általam fejlesztett pixel színelemzésen alapuló képanalízis szoftverek megbízhatóan és reprodukálhatóan, az emberi tényező minimalizálásával képesek megállapítani az indukciós időt a kristálykiválás folyamatáról készített képekből.

Az így kapott indukciós időket kísérlettervezési eszközökkel kiértékelve megállapítottam, hogy a túltelítés mértéke mindkét hatóanyag esetében, illetve a famotidinnél még a kristályosítandó oldat kiindulási hőmérséklete is szignifikánsan befolyásolta a kristálykiválás kezdetét. Az irbezartán esetén a vizsgált segédanyag hatása nem volt kimutatható a megadott konfidenciaszinten.

A termékek mikroszkópos képei alátámasztották a kísérleti eredmények statisztikai kiértékelését, miszerint a növekvő túltelítés szignifikáns hatásaként kisebb méretű és nagyobb számú kristályt keletkezett, ebből adódóan mindkét hatóanyagnál a kristályok aggregációját tapasztaltuk. Az irbezartánnál a segédanyag jelenléte, míg famotidinnél a nagyobb kiindulási hőmérséklet is kristályméret csökkenést okozott az elvégzett kísérletek tapasztalatai alapján. A poli(vinilpirrolidon) korábban már igazolt polimorfiamódosító hatását a famotidin kristályosí-tásában ez alkalommal is azonosítottuk.

Az általam az indukciós idő vizsgálatára kidolgozott eljárás egy megbízható és költséghatékony alternatíva a piacon található turbiditásmérésen alapuló rendszerekhez képest, valamint hozzájárulhat a különböző hatóanyagkristályosítási folyamatok kinetikájának jobb megértéséhez. Emellett hatékony vizsgálati eszköz lehet a hatóanyagkutatási fázisban gyors kristályosítási, illetve oldószer és oldhatóság screening vizsgálatok elvégzésében.

Laboratóriumi méretű PGSS-berendezés fejlesztése poli(etilénglikol)–ibuprofen modellrendszer segítségével

Luterán Gergő, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kőrösi Márton** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Arany Dóra** PhD-hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A mikro- és nanoméretű részecskék előállítása fontos szerepet játszik a modern ipar számos területén, például az élelmiszeriparban, a gyógyszeriparban, a kozmetikumokban, valamint a festékek és polimerek gyártásában. Magas hozzáadott értékű termékek esetében a szuperkritikus szén-dioxidot alkalmazó eljárások lehetőséget kínálnak szűk szemcseméret-eloszlású mikronizált por előállítására. Ezek közül kiemelkedik a PGSS (*Particles from Gas Saturated Solutions*) technológia, amely méretnövelhető és folyamatos üzemmódban is működtethető [1,2]. Az eljárás során nagynyomású CO_2 oldódik a szilárd mintába, amely csökkenti a mikronizálni kívánt olvadáspontját és viszkozitását, majd egy fúvókán történő hirtelen expanzió gyors megszilárdulást és finom részecskék képződését eredményezi. Az üzemi paraméterek beállítását segíti a mikronizálni kívánt anyag szén-dioxid nyomás alatti olvadási viselkedésének ismerete.

Ezen megfontolásokból kiindulva munkám során egy nagynyomású változtatható térfogatú látóüveges cellában végeztem fázisegyensúlyi vizsgálatokat. Elsőként a tiszta, 3000 Da molekulatömegű polietilén-glikol (PEG 3000) olvadási hőmérsékletét határoztam meg 2,5–30 MPa nyomástartományban. A kísérletek eredményeként megfigyelhettem a szén-dioxid olvadáspont-csökkentő hatását, bár a tiszta PEG 3000 olvadási viselkedését leíró adatokat nem találtam, jól illeszkedett a szakirodalomban leírt tendenciákhoz. [3] Az adatok megbízhatóságának növelése érdekében a kísérleteket többször is megismételtem 10 MPa nyomáson. A következő lépésben modellrendszerként a PEG 3000 és a racém ibuprofen keverékét vizsgáltam. Ehhez különböző összetételű mintákat mértem be, amelyeket légköri nyomáson olvasztottam össze a homogén elegy kialakítása érdekében, majd 10 MPa nyomáson tanulmányoztam fázisegyensúlyi viselkedésüket. Az eredmények alapján valószínűsíthető, hogy a két komponens eutektikus rendszert alkot.

A kutatási munkám során aktívan részt vettem egy PGSS berendezés koncepciójának kialakításában, a műszaki tervezésben, valamint az egyes szerkezeti elemek összeállításában. A megvalósítás eredményeként az általunk tervezett rendszer sikeresen bizonyította működőképességét: szuperkritikus szén-dioxid alkalmazásával képes volt PEG 3000, PEG 6000, valamint 10% ibuprofent tartalmazó PEG 3000 kompozit por előállítására. A készülék jelenleg is folyamatos fejlesztés és tesztelés alatt áll, melynek célja, hogy működését még hatékonyabbá és megbízhatóbbá tegyük.

[1] A. V. M. Nunes, C. M. M. Duarte, *Materials*. **2011**, *4* (*11*), 2017–2041. DOI: https://doi.org/10.3390/ma4112017.
[2] E. Weidner, *Journal of Supercritical Fluids*. **2009**, *47* (*3*), 556–565. DOI: https://doi.org/10.1016/j.supflu.2008.11.009.
[3] I. Pasquali, L. Comi, F. Pucciarelli, R. Bettini, *Int J Pharm*. **2008**, *356* (*1–2*), 76–81. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2007.12.048.

Módszerfejlesztés amidkötések kisléptékű, automatizálható szintézisére

Bodrogi Éva, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Havasi Dávid** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A dolgozat célja egy olyan amidkapcsolási reakcióprotokoll kidolgozása volt, amely automatizálható, és jól alkalmazható kisléptékű, nagy áteresztőképességű szintéziskörnyezetekben. A munka során azt vizsgáltam, hogyan ültethető át egy manuális protokoll automatizált formába az Opentrons Flex pipettázó robot segítségével. Ennek során 82 reakciót végeztem manuálisan az optimalizálás céljából, majd 156 reakciót automatizált módszerrel a robottal.

A dolgozat első részében elméleti áttekintést nyújtottam a gyógyszerkutatás korai fázisaiban alkalmazott szűrési stratégiákról, különös tekintettel a nagy számú párhuzamos szintézisek jelentőségére. Kiemelésre került az amidkapcsolás szerepe, valamint annak leggyakrabban alkalmazott szintetikus megközelítése.

A kísérleti munka első szakaszában manuális körülmények között vizsgáltam az amidkapcsolás optimális körülményeit. Több reakcióleállítási (befagyasztási) módszert hasonlítottam össze a pontos analitikai mintavétel érdekében, melyek közül a legmegbízhatóbb eljárás került később alkalmazásra. Emellett optimális kapcsolószer–oldószer kombinációt kerestem, valamint vizsgáltam a kapcsolószerek stabilitását acetonitril oldószerben. Ezek alapján egy robusztus manuális protokollt dolgoztam ki, amelyet később adaptálhattam.

Az így manuálisan kidolgozott protokollt átdolgoztam automatizációs munkafolyamattá. Opentrons Flex pipettázó robot segítségével 96 reakciót hajtottam végre 12 eltérő karbonsavval és 8 különböző aminnal. A sikeres adaptációhoz egyedi labware-definíciókat és pipettázási utasításokat készítettem, amelyek biztosították az oldatok pontos kezelését és a reakciók egyenletes lefutását minden pozícióban.

A munka záró szakaszában a fejlesztett protokollt három különböző kapcsolószerrel validáltam, annak érdekében, hogy megvizsgáljam az eljárás általánosíthatóságát. Az LC–MS alapú analízis megerősítette, hogy a reakciók túlnyomó többsége sikeresen lezajlott, jól detektálható termékcsúcsokkal.

Az LC–MS analízis alapján a reakciók sikeresen zajlottak le, a legtöbb esetben jól detektálható termékcsúccsal. A vizsgálat igazolta, hogy az amidkapcsolási reakciók megbízhatóan automatizálhatók, így a protokoll alkalmas lehet korai fázisú molekulaszűrési vagy gyógyszerkutatási munkafolyamatokba történő beépítésre.

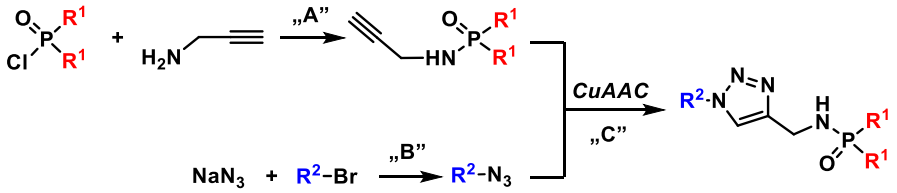
Triazolilfoszforamidátok és -foszfinamidok áramlásos kémiai szintézisének fejlesztése

Gerő Viktória, IV. évf. (BSc.)

Témavezető: **Dr. Bálint Erika** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Steinsits Dániel** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az 1,2,3-triazolszármazékok a nitrogéntartalmú heterociklusok fontos képviselői, széleskörű alkalmazhatóságuknak és potenciális biológiai aktivitásuknak köszönhetően. Kutatómunkám során célul tűztük ki foszforamidát vagy foszfinamid szerkezeti egységet tartalmazó 1,2,3-triazolvegyületek háromlépéses szintézisének megvalósítását áramlásos kémiai rendszerben. Az eljárást környezetbarát szempontokat figyelembe véve kívántuk megvalósítani, így vizsgáltuk alternatív és fenntartható forrásból származó oldószerek, valamint különféle reakciómegvalósítások, úgymint a mikrohullámú melegítés vagy a szonikálás hatását is.

A reakció feltérképezését, választott modellreakciókon – dietil-klórfoszfát vagy difenil-foszfinsav-klorid és propargil-amin („A”), valamint benzil-bromid és nátrium-azid („B”) reakcióin, majd az így előállított köztitermékek cikloaddicióján („C”) – keresztül valósítottuk meg, melyek során vizsgáltuk az oldószer, a hőmérséklet és a tartózkodási idő hatását a reakcióelegy összetételére nézve. Az egyes reakciólépések esetén meghatároztuk az optimális reakcióparamétereket, majd megvalósítottuk a teljes, összekapcsolt szintézist is áramlásos kémiai rendszerben, valamint a kidolgozott eljárást zöldkémiai számításokkal is értékeltük.



A célvegyületek áramlásos kémiai előállításának kidolgozásán túlmenően, célunk volt a végső reakcióelegy feldolgozása is folyamatos rendszerben, membránszeparátor segítségével. Tovább-bi célunk volt a kidolgozott eljárás alkalmazása egy triazolgyűrűs gyógyszerhatóanyag, a rufinamid szintézisében. Ezen kívül tanszéki együttműködésben az előállított vegyületek égésgátló hatását is tanulmányozni kívántuk.

A reakciókat gáz- (GC) és folyadékkromatográfiás (HPLC) mérésekkel követtük. A termékeket GC- és HPLC-MS segítségével azonosítottuk, szerkezetüket ^{31}P-, ^{19}F-, ^{13}C- és ^{1}H-NMR-spektroszkópiával és nagy felbontású tömegspektrometriával (HRMS) jellemeztük.

Háromkomponensű elegyek elválasztása desztillációs eljárásokkal: fejlesztési lehetőségek hőszivattyú alkalmazásával

Somogyvári Erik, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Tóth András József** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A desztilláció a vegyipar által használt egyik legrégebbi technológia, mely még most is a legelterjedtebb műveletnek számít a viszonylagos egyszerűsége, illetve az elválasztási hatékonysága miatt. Hátránya viszont a jelentős üzemeltetési költsége, nagyobb részt a folyamat alacsony energia hatékonysága miatt [1]. Normális esetben a desztillációs oszlopot az üstben lévő magas hőmérsékletű hő táplálja. Ezzel szemben az elválasztás hőszivattyúk villamos energiával való meghajtásával is megvalósíthatók, ami csökkentheti a szeparációhoz szükséges fűtő- és hűtőáramok használatát, a további elektromos kompressziós munka befektetésével. A kutatásom során három különböző szeparációs indexszel rendelkező, alkohol alapú keverékek elválasztását vizsgáltam különböző felépítésű hőszivattyús desztillációs rendszer segítségével ASPEN Plus V.10 professzionális folyamatszimulátorral. A kutatás átfogóan értékeli a konvencionális, hőszivattyús, osztott falú és ezek kombinációjával létrehozott rendszereket, beleértve az összes konfiguráció energiaigényét, az exergiáját, illetve a rendszerek beruházási és üzemeltetési költségeit. A célom, egy olyan optimalizált hibrid folyamattervezés kidolgozása, amely hőszivattyúval, osztott falú kolonnával és ezek kombinációjával elért energiahatékonysággal rendelkezik. Ezenfelül teljeskörű elemzést végez, arról, hogy a különböző szeparációs indexű alkohol elegyek, milyen hatással, előnyökkel vagy éppen hátrányokkal járhat a hőszivattyús és osztott falú kolonnás módszerek esetén. A hőszivattyús eljárások használatával történő energiabefektetés csökkentheti a fosszilis tüzelőanyagoktól való függőséget az ipari ágazatban és elősegítheti a tiszta energiahasználat elvével kapcsolatos fenntarthatósági kritériumok teljesülését. Az elektromos áramfelhasználás integrálásával az iparágak csökkenthetik a fűtőgőz felhasználásukat, melyből következően csökkenthető a vállalat működési költsége is.

[1] Anton A. Kiss, Robin Smith, Rethinking energy use in distillation processes for a more sustainable chemical industry, *Energy*, **2020**, *203*, 117788. DOI: https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117788

Kétlépéses one-pot szintézis pipettázórobottal való automatizálásának vizsgálata

Orbán Kristóf, 12. évf. (középiskolás)

Pál Dóra Nikolett, 12. évf. (középiskolás)

Ferences Gimnázium, Szentendre

Témavezető: **Dr. Havasi Dávid** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Kutatásunk során kétlépcsős, SNAr és amidkapcsolás reakciókból álló szintéziseket vizsgáltunk. Célunk volt kideríteni, hogy ezen szintézisek one pot módszeres lebonyolítása hatékonyan megvalósítható-e és hogy az automatizáció segíti illetve gyorsítja-e a folyamatot. Ezen reakciók relevánsak, hiszen a gyógyszeriparban gyakran használt mechanizmusok, továbbá hasonló körülmények között mennek végbe, így optimálisak egy one pot megközelítés kiértékelésére. Ez lehetségessé teszi a reakciók közti költségigényes tisztítási folyamat elengedését.

Kísérleteinket az Opentrons Flex nevű pipettázórobottal végeztük el. Az Opentrons saját felületén terveztünk meg hozzá a kísérlethez szükséges protokollt. A DIPEA szerves bázist használtuk, mivel jól működik DMF-ben és kritikus az ideális reakciókörülmények megteremtéséhez. A COMU amidkapcsoló szert használtuk, mert szintén jól működik DMFben, hatékonyabb, mint más amidkapcsoló szerek és kevésbé veszélyes bomlástermékekkel rendelkezik. A kísérletek kiértékelését LC–MS-folyadékkromatográfiával végeztük.

Elvégeztünk egy előkísérletet manuális módszerekkel, mely sikeres volt. Ezután 4 szintézist (8 reakció) bonyolítottunk le a pipettázórobot segítségével, melyek közül 2 (6 reakció) biztosan sikerült, egy bizonytalan és egy kudarcot vallott. Ez bizonyította a one pot módszer legalább is részleges sikerét. Az automatizáció nagy segítségnek bizonyult, és bár egy pár limitációval, de gyorsabbá, hatékonyabbá és precízebbé tette a munkafolyamatot. A protokoll pedig végtelenszer újraismételhető akár ugyanezen reagensekkel akár másokkal, így a kísérlet könnyen reprodukálható.

Szerintünk ez a technológia sok potenciált hordoz magában, és fontos vonatkozásai lennének a gyógyszeriparban.

Hibrid modellezés adaptív mesterséges neuronhálókkal: precizitás megőrzése számítási költségcsökkentés mellett

Kiss Bendegúz Barnabás, II. félév (MSc)

Témavezető: **Dr. Szilágyi Botond** egyetemi docens
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A modern vegyészmérnöki gyakorlatban elengedhetetlenek a megbízható folyamatmodellek, amelyek többnyire fizikai alapokon nyugszanak, és részletes termodinamikai, valamint (reakció)kinetikai modelleket tartalmaznak. Ezek a tervezési fázisban, a készülékek méretezésén túl, a folyamatok optimális működtetésében is kulcsszerepet játszanak, segítve az üzemet az aktuális gazdasági környezethez való alkalmazkodásban. A modellalapú irányítás gyorsabb zavaráskompenzációt és biztonságosabb működtetést tesz lehetővé, gazdasági előnyöket biztosítva. Mindazonáltal a pontosság és megbízhatóság arányos a számítási igénnyel, fordított arányban áll a megoldási idővel, így valós idejű irányítás komplex mechanisztikus modellekkel csak szélsőséges esetekben valósítható meg. A számítási igény az optimális tervezésnél is problémás: egyes optimalizálási feladatok akár napokig vagy hetekig is futhatnak. Kompromisszumként, elsősorban optimális irányításban, gyakran alkalmaznak fekete doboz modelleket, amelyek valós idejű mérésekre támaszkodva kompenzálják a pontatlanságokat.

A dolgozat célja egy olyan statisztikai és fizikai modellekből álló hibrid elrendezés bemutatása, amely csökkenti a mechanisztikus modellekre támaszkodó optimalizálások számításigényét, miközben a pontosság lényegében megmarad. Az osztályozó és regressziós modellek soros kombinációja lehetővé teszi pontos eredmények előállítását ismeretlen inputok esetén is: az osztályozó modell választja ki, hogy a gyors regressziós modell adott inputokra szükségesen pontos-e, vagy a lassabb, de pontos mechanisztikus modellt kell használni. Minden mechanisztikus modell számítását mentjük, ami alapján folyamatosan újratanítjuk az osztályozó, és regressziós hálót is, így azok minél többször voltak bevetve, annál alaposabban vannak tanítva (hasonlóan a szakemberek éveken át akkumulálódó tapasztalatához). A munkában két többcélú optimalizációs esettanulmányt vizsgáltunk. Az első egy elméleti, kétváltozós célfüggvény, ahol az ismételt optimalizálások során a célfüggvény-hívások jelentős részét már neuronháló végezte, (~70%) az osztályozó modell pedig megbízhatóan előrejelezte a regressziós teljesítményt. A második egy biokémiai reakció (fruktóz-glükóz konverzió) dinamikus modellezése, ahol a helyettesítő modell egyre több költséges differenciálegyenlet-megoldást váltott ki gyors neurális becsléssel (~20-30%).

Eredményeink szerint a számítási igény jelentősen csökkent, és a módszer potenciálja a modellek összetettségével tovább nő. Kitérünk a hibrid megközelítés további fejlesztést igénylő pontjaira, mint az automatikus újratanítás, és zárásként a jövőbeli kilátásokat tárgyaljuk.

Poliuretán gyanta félfolyamatos hidrolízise szubkritikus közegben

Kerekes Bálint, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Székely Edit** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Kántor Petra** PhD-hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A poliuretán napjaink egyik legjelentősebb műanyagja; egyes becslések szerint a 6. legnagyobb mennyiségben gyártott, és sokoldalú felhasználása miatt a kereslet folyamatosan nő. A világszintű poliuretán termelés emelkedésével évről évre egyre nő az aktuálisan képződő és felhalmozódó hulladék, melynek jelentős hányada lerakásra kerül. A Plastics Europe [1] becslése szerint a fosszilis forrásból származó poliuretán mennyisége 2023-ra elérte már a 22 millió tonnát és az eddigi trendek alapján további növekedés várható.

A körforgásos gazdaság megvalósításához elengedhetetlen a fosszilis forrásból előállított műanyagoknak újrahasznosítása. Számos különböző megközelítés közül a szolvolitikus eljárások előnye, hogy lehetővé teszik a kontrollált bontást. A szakirodalomban több poliuretán szolvolízis és hidrolízis ismert szakaszos rendszerben, sokszor adalékok, katalizátorok hozzáadásával. [2]

Az irodalmi eredményekre építve a kutatásom célja egy katalízis nélküli, félfolyamatos, szubkritikus hidrolízis kidolgozása egy, a kiskereskedelmi forgalomban kapható alapanyagokból, a laboratóriumban előállított poliuretán gyantán. A mérésekhez egy, a kutatócsoport által összeállított, félfolyamatos csőreaktort használtam szubkritikus vízzel és egy segédoldószer-árammal a reaktor után. Méréseim során a hőmérséklethatás vizsgálatát is elvégeztem, 225–350 °C tartományban. A félfolyamatos hidrolízist közel 100%-os bontási hatásfokkal sikerült elvégezni 300 °C, 10 perc reakcióidő és 2 ml/perc víz térfogatáram esetén. Sikerült azonosítani a szerves fázisban oldható főbb komponenseket GC–MS segítségével. A lebontott gyanta termékei közül a 4,4'-metiléndianilinra kalibrációt készítettem, mennyiségét GC-FID segítségével határoztam meg, amely komponens az izocianát gyártása során költségmeghatározó. Megfigyeltem a 4,4'-metiléndianilin magasabb hőmérsékleten történő hőbomlását és az alkalmazott poliuretán poliolláncainak felszakadását is, míg a TGA-mérésekkel a poliuretán és a maradék fő tömegveszteségeit azonosítottam.

Az általam bemutatott módszerrel a poliuretán-hulladék egy gyors és magas hatásfokú hidrolízise valósítható meg.

[1] Plastics Europe AISBL, (n.d.). https://plasticseurope.org/knowledge-hub/plastics-the-fast-facts-2024/ (accessed October 9, 2025).

[2] Z. Dai, B. Hatano, J.I. Kadokawa, H. Tagaya, Effect of diaminotoluene on the decomposition of polyurethane foam waste in superheated water, *Polym Degrad Stab* 76 (2002) 179–184. https://doi.org/10.1016/S0141-3910(02)00010-1.

Sonogashira-kapcsolás automatizálási lehetőségének vizsgálata pipettázórobottal

Vasas Ádám, 12. évf. (középiskolás)
Tóth Árpád Gimnázium, Debrecen

Imre Veronika, 10. évf. (középiskolás)
Miskolci Egyetem Földes Ferenc Gyakorló Gimnázium

Vígh Sára, 11. évf. (középiskolás)
Szalézi Szent Ferenc Gimnázium, Kazincbarcika

Témavezető: **Dr. Havasi Dávid** Egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A kutatás célja a Sonogashira keresztkapcsolási reakció olyan változatának azonosítása és gyakorlati tesztelése volt, amely alkalmas automatizált, pipettázó robotos környezetben történő kivitelezésre. A kiválasztott módszernek egyszerűnek, megbízhatónak és reprodukálhatónak kellett lennie, ugyanakkor nem igényelhetett inert atmoszférát vagy különleges, illetve költséges előkészítési körülményeket. A vizsgálat során több lehetséges megközelítést is elemeztünk, köztük a klasszikus, NHC-ligandumos, vizes és a Gogoi és munkatársai féle réz- és ligandummentes eljárásokat. Ezen módszerek közül a Gogoi és munkatársai által leírt protokoll bizonyult a legígéretesebbnek, mivel a levegő jelenlétében is jól működik, valamint olcsó, stabil reagenseket és egyszerű alkoholos oldószert alkalmaz.

Az előkísérletek során igazoltuk, hogy a $PdCl_2/Na_2SO_4/K_2CO_3$ katalizátorok izopropil-alkoholban, 95 °C-on és 1 órás reakcióidő mellett képes a várt termékek létrehozására. A termékek LC–MS-analízissel történő azonosítása egyértelműen jelezte, hogy a reakció a várakozásoknak megfelelően lezajlott, és nem mutatott számottevő mellékreakciókat. Ezzel megerősítést nyert, hogy a kiválasztott reakció alkalmas automatizált platformon történő kivitelezésre. A robotos kísérletek során az Opentrons Flex folyadékkezelő rendszert használtuk, amely precíz pipettázási műveletekre és reprodukálható munkafolyamatokra képes. A kísérlet során 4 különböző aril-halogenid és 3 terminális alkin kombinációit vizsgáltunk, amelyek a Sonogashira-reakció alapelvei szerint várt termékeket eredményezhettek. Az LC–MS vizsgálatok alapján a 12 reakcióból 7 esetben sikerült kimutatni a kívánt terméket, ami 58%-os sikerarányt jelentett. A kísérletek igazolták, hogy a levegőn, réz- és ligandummentesen végzett Sonogashira-reakció jól automatizálható, és az Opentrons Flex típusú pipettázó robot alkalmas kismennyiségű szintetikus reakciók precíz és ismételhető végrehajtására.

Az alkalmazott módszer a gyógyszerkutatás és anyagtudomány területén is hasznosítható, különösen olyan esetekben, ahol nagyszámú, kis mennyiségű minta párhuzamos szintézise szükséges. A projekt során szerzett tapasztalatok rávilágítottak arra, hogy a kémiai automatizálás nem csupán idő- és költséghatékonysági szempontból előnyös, hanem jelentős mértékben csökkenti az emberi hibák esélyét és növeli a reprodukálhatóságot. Összességében elmondható, hogy a Gogoi és munkatársai féle Sonogashira-reakció sikeresen alkalmazható automatizált pipettázó robot segítségével, és a kísérletek eredményei megerősítik, hogy a levegőn is stabil, egyszerűen kezelhető rendszerek új lehetőségeket nyitnak a laboratóriumi szintézisek automatizálása felé.

Fotokatalizált C–C kapcsolási reakció optimalizálása kísérlettervezéssel

Gémes Gergő, II. évf. (MSc)

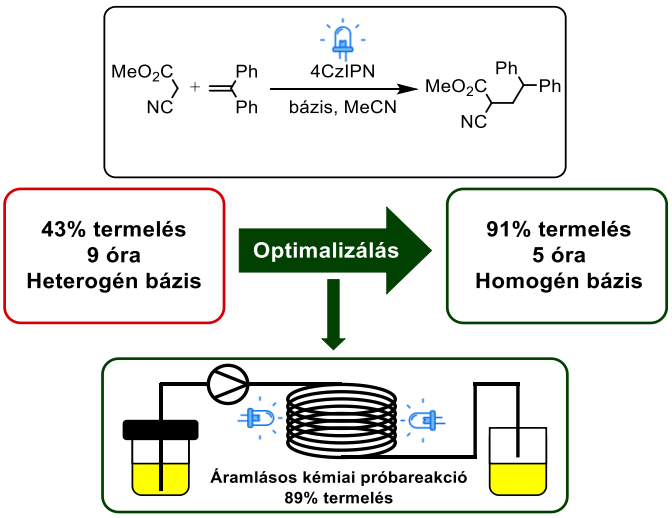
Témavezető: **Dr. Kupai József** habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Richter Dóra** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A fotokatalízis napjainkban reneszánszát éli – a fotont nevezik a 21. század reagensének is. Népszerűségét annak köszönheti, hogy segítségével kimondottan enyhe körülmények közt végezhetünk, akár közismerten nehézkes átalakításokat is.

A fotokatalitikus reakciók eredményét számos tényező befolyásolhatja, ezért optimalizálásuk nem mindig egyszerű feladat. Munkám során egy korábbi kutatásaim alatt vizsgált reakció (1. ábra) optimalizálását végeztem el kísérlettervezés segítségével.

A kísérlettervezést megelőzően, egy pontos, reprodukálható folyamatot terveztem, megállapítottam a vizsgálni kívánt faktorokat, oldószer- és bázis-screening kísérleteket végeztem, és vizsgáltam a reakció időbeli lefutását a reakcióidő meghatározásához. Egy 2^4 teljes faktoros terv alapján felállítottam egy modellt, ami a validáló mérések alapján jól leírta a reakciót. A *Box–Wilson*-optimalizálás, és az azt követő újabb validálás után a már optimalizált reakciók átlagos termelése 91% lett, ami az kiindulási körülmények között 43% volt. Emellett a KO^{t}Bu heterogén bázist sikerült a homogén DBU-ra cserélni, ami a jövőben a reakció áramlásos kémiai megvalósítását is lehetővé teszi. Ennek igazolására egy próbareakciót is végeztem, amely 89% termelés mellett szolgáltatta a terméket (***1. ábra***).

Tudomásunk szerint az irodalomban fotokatalitikus reakciót nem optimalizáltak korábban kísérlettervezéssel.



1. ábra **Az optimalizálni kívánt reakció, valamint az optimalizálás eredményei**

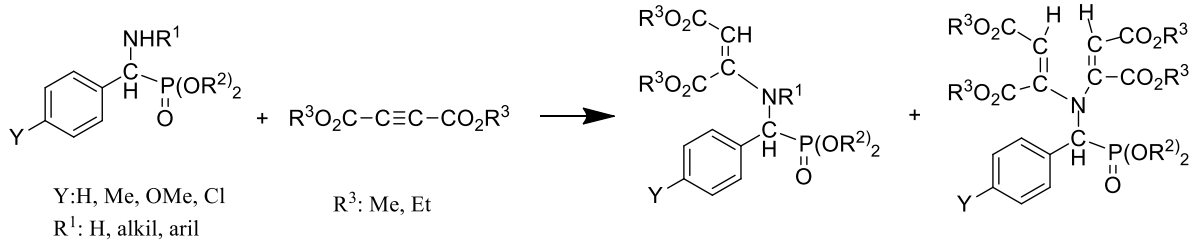
Potenciálisan bioaktív P-vegyületek szintézise α-aminofoszfonátok acetilénszármazékokra való addíciójával

Bese Cintia, II. évf. (MSc)

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

Az α-aminofoszfonátok az α-aminosavak szerkezeti analógjaiként kiemelkedő jelentőséggel bírnak a gyógyszerkémiai kutatásokban. Számos tanulmány igazolta, hogy különböző szubsztituensektől függően antibakteriális, antivirális, antitumor és gyulladáscsökkentő aktivitással rendelkeznek. A foszfonát-funkciós csoport jelenléte fokozza metabolikus stabilitásukat és enzim inhibíciós hatást kölcsönöz, ami ígéretes kiindulási ponttá teszi őket új bioaktív molekulák tervezéséhez.

A kiindulási α-aminofoszfonátok előállítását követően csoportunk korábbi reakciói mentén előállítottam N-alkil- és N-aril szubsztituált, illetve szabad NH_2-csoportot tartalmazó α-aminofoszfonátokat, majd ezeket dialkil-acetiléndikarboxilátra (DAAD) addícionáltattam.



Y:H, Me, OMe, Cl
R^1: H, alkil, aril
R^2: Me, Et

R^3: Me, Et

Az így előállított 13 új vegyületet minden esetben ^{31}P-, ^{13}C-, ^{1}H-NMR, illetve LC–MS-, HRMS-mérésekkel azonosítottuk és igazoltuk.

Munkám során arra törekedtem, hogy a kísérletek a zöldkémia és a fenntartható fejlődési célok szellemében valósuljanak meg. A MW eljárás szerint oldószermentesen, a tercier-amin katalizátor alkalmazásával enyhe körülmények között végzett alkenilezések jól bizonyítják, hogy a hatékony és zöld eljárásoknak nem kell, hogy kizárják egymást.

Az előállított 13 addukt potenciálisan bioaktív vegyület, a *myeloma* elleni vizsgálatok jelenleg zajlanak a Semmelweis Egyetemen, melyek a dolgozat elkészültéig nem, de a TDK konferencia idejére elkészülnek.

Bacillamid alkaloidok és antipódjaiknak enantioszelektív szintézise

Batizi Benedek, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Pollák Patrik** PhD-hallgató
Egis Gyógyszergyár Zrt.
Konzulens: **Dr. Keglevich Péter** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológiai Tanszék

A bacillamid alkaloidok iránti tudományos érdeklődést kifejezett algicid és potenciális daganatellenes aktivitásuk indokolja, melyek révén e vegyületcsoport ökológiai és farmakológiai szempontból egyaránt figyelemre méltó. A szakirodalom áttekintése azonban számos ellentmondást tárt fel a természetes és szintetikusan előállított bacillamidok sztereokémiájával kapcsolatban, különösen az abszolút konfiguráció és az optikai forgatóképesség hozzárendelésében.

Munkám során a bacillamidok B–D, a neobacillamid A, valamint antipódjaik új, enantioszelektív szintézisét dolgoztam ki, a 2-(1-hidroxietil)-tiazol megfelelő enantiomerjeiből kiindulva. Az előállított vegyületek abszolút konfigurációját és optikai forgatóképességét részletesen meghatároztam. A kutatás során királis HPLC-módszereket fejlesztettünk az enantiomerek elválasztására és enantiomerfeleslegük (ee) pontos kimutatására.

Az így kidolgozott enantioszelektív szintézis és az enantiomerek egyértelmű sztereokémiai azonosítása nemcsak a bacillamid alkaloidok szerkezet–hatás kapcsolatrendszerének mélyebb megértését teszi lehetővé, hanem alapot biztosít új, potenciálisan fokozott biológiai aktivitású szintetikus analógok tervezéséhez is, amelyek a jövőben ígéretes kiindulópontot jelenthetnek gyógyszerkutatási és biotechnológiai fejlesztések számára.

Homok mint heterogén katalizátor a poli(etilén-tereftalát) gazdaságos depolimerizációjában

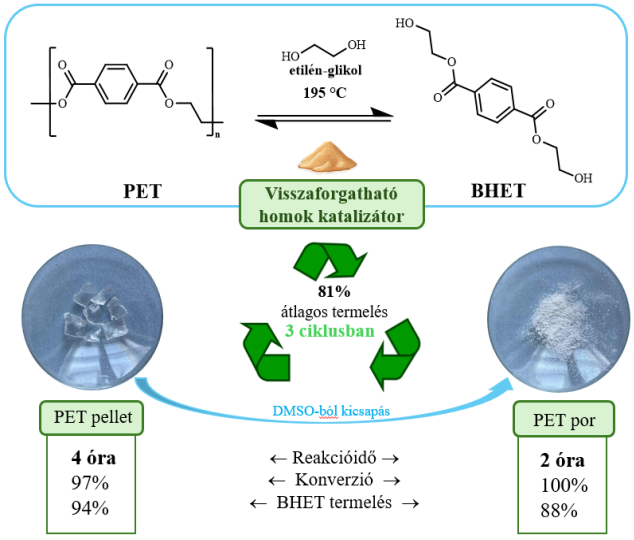
Ráduly Amália, I. évf. (MSc)

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

A poli(etilén-tereftalát) (PET) a legelterjedtebb biológiailag nem lebomló műanyag, amely jelentős mértékben halmozódik fel hulladékként a környezetben. Ezért rendkívül fontos a PET-hulladék újrahasznosítása, amellyel csökkenthetjük a környezetre gyakorolt káros hatásokat, és megőrizzük a nem megújuló energiaforrásokat. A kutatási munkám során hulladék PET-palack őrlemény bisz(2-hidroxietil)-tereftalát (BHET) monomerré történő depolimerizációját valósítottam meg (***1. ábra***).

A PET-glikolízisben alkalmazott, irodalomban ismert katalizátorok sok esetben drágák, bomlékonyak, valamint környezetszennyezőek. Célom egy olcsó, stabil és környezetbarát katalizátor alkalmazása volt a PET lebontására. Egy természetes alapú, heterogén katalizátort, a homokot felhasználva vittem véghez a reakciót. A világ 14 különböző pontjáról származó homokmintát vizsgáltam, és hasonlítottam össze katalitikus aktivitásuk alapján. Tanulmányoztam milyen hatást gyakorol a katalizátor kémiai összetétele, szemcsemérete illetve szemcse alakja a reakció hatékonyságára. Több szempont figyelembevételével választottam ki a legalkalmasabb katalizátort, mérlegelve a BHET-termelés mértékét, a homok rendelkezésre állását, valamint kémiai és fizikai tulajdonságait.

A kiválasztott legjobb homokot 3 ciklusban visszaforgattam, átlagosan 91%-os termelést elérve. Kémiai úton előállítottam PET-port a hulladékőrleményből, amellyel a depolimerizáció reakcióidejét sikerült a felére csökkenteni, így két óra elegendőnek bizonyult a teljes mennyiség lebontásához.



1. ábra: ***A PET kémiai lebontása homokkatalizátorral***

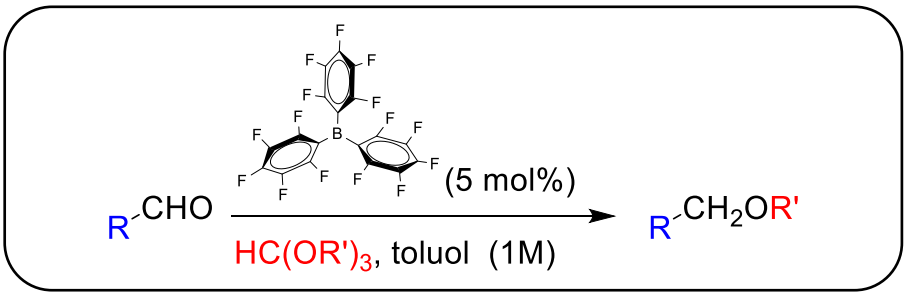
Aldehidek reduktív éteresítése, egy nem szokványos hidridtranszfer

Győrfi Sára, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Soós Tibor** kutatócsoport-vezető
HUN-REN TTK SZKI, Organokatalízis Kutatócsoport
Hegedüs Kristóf tudományos munkatárs
HUN-REN TTK SZKI, Organokatalízis Kutatócsoport
Forman Ferenc tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK SZKI, Organokatalízis Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az aldehidekből éterekké történő átalakítás a szerves kémia területén régi cél, amelynek ipari hasznosságát az illatanyag- és az üzemanyagipari alkalmazások támasztják alá, ugyanakkor a reakció megvalósítása továbbra is szintetikai kihívást jelent.

Munkámban egy új, egyszerűbb és hatékonyabb reduktív éteresítést mutatok be, amely az ortoformiátok eddig kihasználatlan hidriddonor képességére épül (***1. ábra***). Ezek az olcsó és széles körben elérhető reagensek nemcsak alkilcsoport-forrásként, hanem redukáló szerepben is alkalmazhatók. A folyamat kulcsa a trisz(pentafluorfenil)borán, amely Lewis-sav katalizátorként lehetővé teszi a hidridtranszfert. Eredményeim igazolják, hogy organokatalitikus körülmények között sincs szükség hidrogén alkalmazására a reduktív éteresítéshez.



1. ábra Jelen dolgozatban ismertetett reakció és körülményei

Az eljárással 45 különböző étert állítottam elő aldehidekből, inert körülmények között. A reakciókörülményeket hét kulcsparaméter szerint optimalizáltam, és részletes mechanizmusvizsgálatot végeztem, amellyel feltártam a folyamat főbb lépéseit, és azonosítottam az intermediereket.

Ezekkel az eredményekkel egy olyan új szintetikus stratégiát alakítok ki, amely egyszerűbb, fenntarthatóbb, és széles körben alkalmazható alternatívát jelent a reduktív éteresítés megvalósítására.

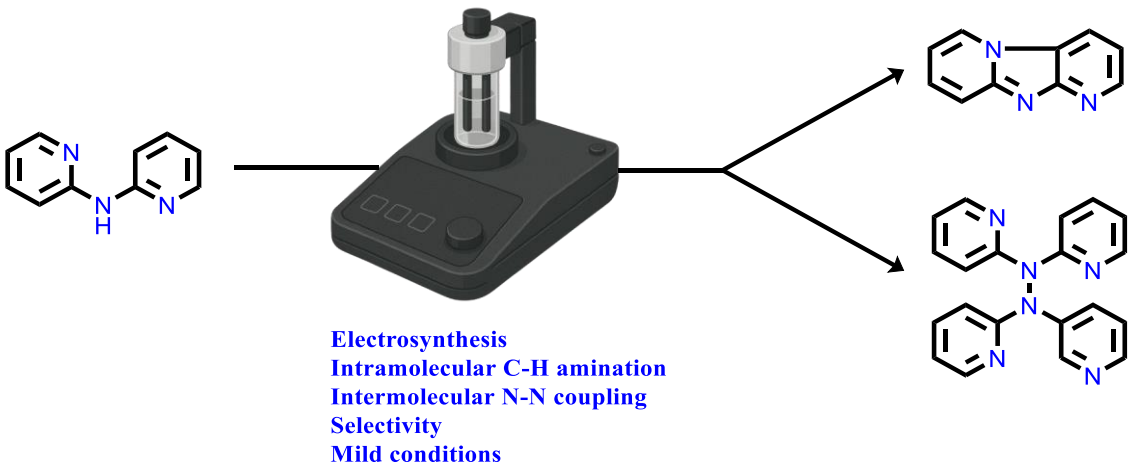
Electrochemical oxidation reactions of di(pyridin-2-yl)amine

Nguyen Van Nghiem, 4th year (BSc)

Supervisor: **Dr. Ervin Kovács** research fellow
HUN-REN RCNS Polymer Chemistry and Physics Research Group
Consultant: **Dr. László Hegedűs** habil. associate professor, head of department
BME Department of Organic Chemistry and Technology

Nitrogen-containing fused aromatic heterocycles play a crucial role in diverse fields such as herbicides, insecticides, materials science, and particularly in pharmaceuticals. The synthesis of these compounds has been developed through various approaches; however, the current trend in science in general, and in chemistry in particular, emphasizes sustainability and environmental friendliness. In recent years, electrochemical methods have been extensively investigated in organic chemistry, including their application to the synthesis of nitrogen-containing fused aromatic heterocycles. By employing this strategy, the use of hazardous reagents as well as harsh reaction conditions can be avoided.

In this thesis, we will investigate the electrochemical ring closure of di(pyridin-2-yl)amine with the aim of synthesizing condensed imidazole-based compounds via electrochemical methods. Initial experiments will be carried out in the presence of iodide mediators. Subsequently, we will study the electrocatalytic oxidation using $Pd(OAc)_2$ as a catalyst, where dimerization of nitrogen-centered radicals is anticipated to be the dominant pathway rather than ring closure. Based on the results, we aimed to optimize the reaction conditions in order to achieve selective electrosynthesis between the dimers and the desired imidazole derivatives. By fine-tuning the reaction parameters, we successfully prepared and isolated non-dimerized oxidation product as well.



Dinamikus aszimmetrikus indukció sajátságainak vizsgálata az első koronaéterrel katalizált enantioszelektív áramlásos Strecker-reakció felfutási szakaszában

Hahn Vencel Károly, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Golcs Ádám** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Dr. Huszthy Péter** Professor Emeritus, az MTA rendes tagja
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Strecker-reakció egy olyan klasszikus szintézis, amellyel α-aminosavak és azok származékai állíthatók elő. Ilyen származékok lehetnek építőkövei fontos gyógyszeripari hatóanyagoknak. Pontosan emiatt hatalmas igény övezi a aszimmetrikus Strecker-szintézis modern megközelítéseit, azok alkalmazását, kihasználását, standardizálást és optimalizálást.

Jelen dolgozatomban bemutatjuk az első olyan alkalmazást, amelyben kovalensen rögzített, enantiomertiszta koronaétert használtunk katalizátorként egy folyamatos áramlású, enantioszelektív Strecker-reakcióban. A modellátalakítást – benzaldehid, anilin és KCN reagáltatásával – egy töltöttágyas reaktorban végeztük, amely funkcionális szilika gélt tartalmazott, kovalensen módosítva enantiomertiszta akridino-koronaéterrel. A stacionárius állapotot megelőző tranziens fázist szisztematikusan vizsgáltuk izoterm körülmények között, diklórmetán és etanol oldószerek alkalmazásával. A kimeneti frakciók gyűjtésével és elemzésével tanulmányoztuk, hogyan befolyásolja az oldószer polaritása mind a konverziót, mind az enantioszelektivitást a felfutási szakasz során. Meglepő módon az etanol jobb konverziót és enantioszelektivitást eredményezett, annak ellenére, hogy korábbi várakozások kevésbé poláris környezetet valószínűsítettek kedvezőbbnek. Eredményeinket mechanisztikus megfontolások támasztják alá, amelyek ionpár-képződési és szolvatációs hatásokat feltételeznek a rögzített katalizátor közvetlen mikrokörnyezetében. A munka kiemeli az aszimmetrikus indukció dinamikus természetét áramlásos körülmények között, és korai betekintést nyújt egy eddig még nem vizsgált katalitikus rendszer működésébe.

Apparicin új, enantioszelektív totálszintézisének vizsgálata

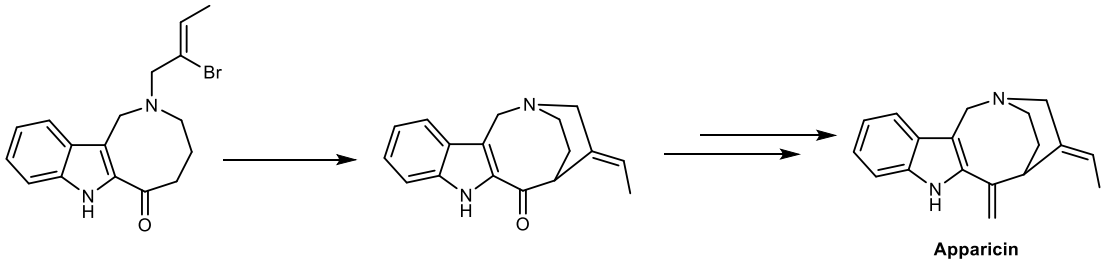
Burkódi Mikes, III. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Soós Tibor** kutatócsoport-vezető
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Hegedüs Kristóf tudományos munkatárs
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék

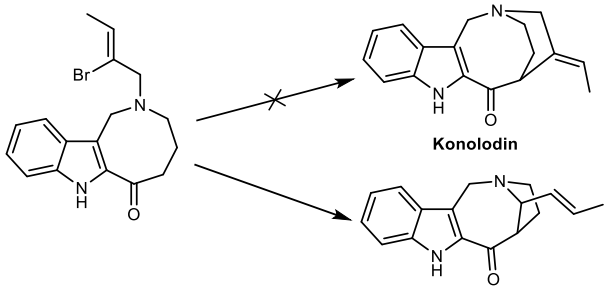
A természetes vegyületek és származékaik biológiailag aktív molekulák kimeríthetetlen tárházát biztosítják. Az indolvázas alkaloidok egyik alosztálya, a sztemmadeninvázas vegyületek is számos, biológiai aktivitást mutató és gyógyászati szempontból ígéretes molekulát tartalmaz. Ebbe az alosztályba tartozik például a konolidin, amely potenciális fájdalomcsillapító hatással bír és az apparicin, amely potenciális fájdalomcsillapító és gyulladáscsökkentő hatása mellett malária elleni aktivitást is mutatott [1].

Kutatásom célja az utóbbi vegyület egy új, deszimmetrizáláson alapuló totálszintézisének a megvalósítása. A szintetikus stratégia során széles körben hozzáférhető alapanyagokból tervezek megvalósítani egy divergens szintetikus utat a célvegyület és származékainak irányába.

A konolidin és származékaihoz a szakirodalomban leírt korábbi előállítások tapasztalatait felhasználva egy enamin katalizált aszimmetrikus Heck-reakcióval tervezem kialakítani a vegyületben található kiralitáscentrumot, melyből a célvegyület egyszerű szintetikus átalakításokkal, optikailag aktív formában előállítható.



Kutatásom eredményeképpen sikerült új, a szakirodalomban eddig nem ismert molekulákat előállítani és újszerű reaktivitást megfigyelni.



3-Hidroxi-tetrahidrofoszfinin-oxidok előállítása és foszfinoilezése

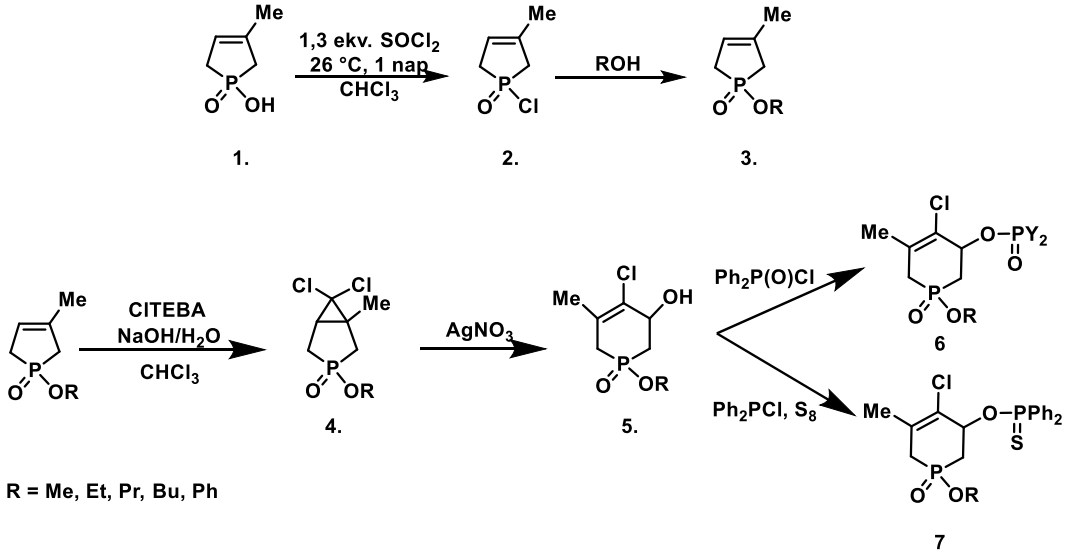
Szloboda Kristóf, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Keglevich György** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Szalai Zsuzsanna** PhD-hallgató

A foszfortartalmú heterociklusok fontos szerepet töltenek be a modern szerves kémiában, köszönhetően reakciókészségüknek és sokoldalú alkalmazásaiknak, többek között katalizátorként és biológiailag aktív molekulákként.[1]

Munkám célja a tetrahidrofoszfinin-oxidok (**5**) előállítása és kémiai módosításainak vizsgálata volt. Kiindulási foszfinsav-származékból (**1**) több lépésben sikerült előállítani az alkoxifoszfolén-származékokat (**3**)[2], majd fázistranszfer katalizátor jelenlétében diklórkarbén adduktokat (**4**) hoztunk létre, amelyek diasztereomerek keverékeként képződtek[3]. Ezeket sikeresen szétválasztottunk, és szerkezetüket egykristály-röntgendiffrakcióval is igazoltuk. A továbbiakban gyűrűnyitással előállítottuk a tetrahidrofoszfinin-oxidokat (**5**), amelyekből a hidroxilcsoport foszfinoilezésével új, eddig nem ismert származékokhoz (**6**) jutottunk. Ezen kívül a P=S analógokat (**7**) klór(difenil)foszfin és elemi kén felhasználásával nyertük.

A nyerstermékeket oszlopkromatográfiával tisztítottuk, míg a szerkezetazonosítást ^{31}P-, ^{13}C- és ^{1}H-NMR- és HRMS-vizsgálatokkal végeztük. A szintetizált *P*-heterociklusok további vizsgálata citotoxikus aktivitásra folyamatban van, amely elősegítheti a biológiai relevanciájuk feltárását.



1. Yu, H., Yang, H., Shi, E. & Tang, W. Development and Clinical Application of Phosphorus-Containing Drugs. *Med Drug Discov* 8, 100063 (2020).
2. Arbuzov, B.A., Vizel, A.O., Szamitov, J.J., Ivanovszkaja, K.M., Dokl. Akad. Nauk. SSSR, 1964, 159, 582.
3. Keglevich, G. *et al.* THE STEREOCHEMISTRY OF THE DICHLOROCYCLOPROPANATION REACTION OF 2,5-DIHYDRO-LH-PHOSPHOLE1-OXIDES. *Phosphorus Sulfur Silicon Relat Elem* 54, 73–79 (1990).

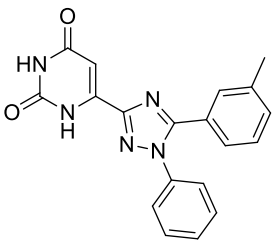
Potenciális TRADD-TRAF2- és c-FLIP-inhibitorok totálszintézise

Papp Márton, II. évf. (MSc)

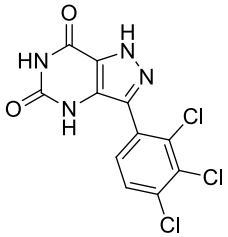
Témavezető: **Dr. Bálint Erika** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Steinsits Dániel** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az onkológiai szerek fejlesztése folyamatosan és nagy intenzitással zajlik a tudományos világban és a gyógyszeriparban. Ezen vegyületek létrehozásához elengedhetetlen a rosszindulatú daganatos sejtek működésének feltérképezése. Ennek egyik fontos aspektusa az apoptózis (sejthalál) folyamatának feltárása.

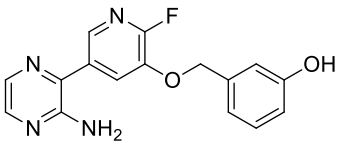
Az elmúlt években számos kutatás foglalkozott az apoptózisban résztvevő fehérjék szerepével, mint például a TRADD-TRAF2 komplex és a c-FLIP fehérjékkel, melyek apoptózist akadályozó tulajdonságokkal rendelkeznek. Kutatómunkám célkitűzése négy olyan vegyület (**1**–**4**) totálszintézisének kidolgozása volt, melyek *in silico* molekulamodellezés eredményeként születtek és potenciálisan gátolják az említett fehérjéket. A kapott molekulák előállításához retroszintetikus megközelítést alkalmaztunk. Az uracilil-triazol (**1**), a triklórfenil-oxipurinol (**2**), az aminopirazin-származék (**3**) és a dibenzofuranil-aminouracil (**4**) totálszintézisekor a szerves kémiai reakciók széles spektrumát haszáltam fel.



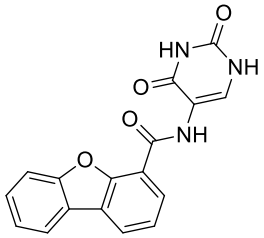
1



2



3



4

Munkám során a kísérleteket tömegspektrométerrel kapcsolt kromatográfiás módszerekkel (HLPC-MS és GC-MS) követtem nyomon, valamint az előállított intermediereket és termékeket flash oszlopkromatográfiás módszerrel tisztítottam, szerkezetüket pedig ^{1}H- és ^{13}C-NMR-spektroszkópiás mérésekkel, valamint nagyfelbontású tömegspektroszkópiás (HRMS) mérésekkel igazoltam.

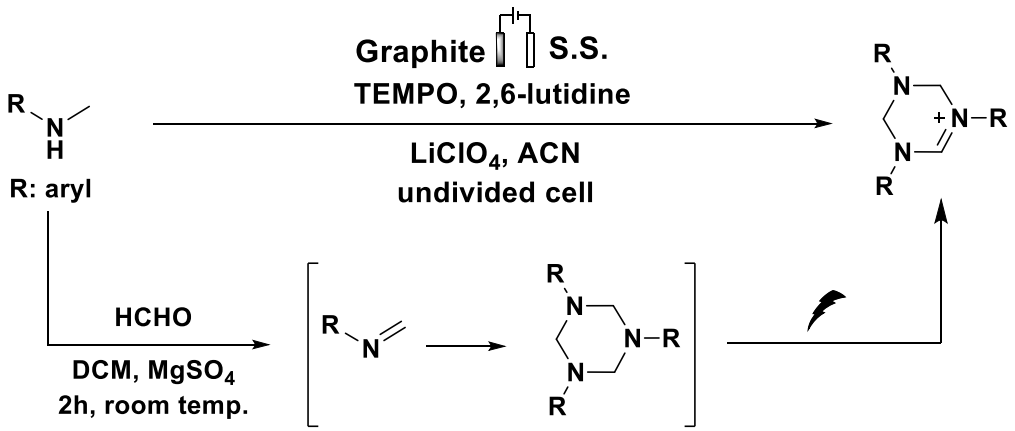
Electrosynthesis of 2,3,4,5-tetrahydro-1,3,5-triazin-1-iums as valuable building blocks in organic synthesis

Lam Thi Da Thao, 1st year (MSc)

Supervisor: **Dr. Ervin Kovács** research fellow
HUN-REN RCNS IMEC Polymer Chemistry and Physics Research Group
Consultants: **Dr. László Hegedűs** habil. associate professor, head of department
BME Department of Organic Chemistry and Technology
Xu Zhining, PhD student
HUN-REN RCNS IMEC Polymer Chemistry and Physics Research Group

Bench-stable *N*-heterocyclic carbene (NHC) precursors, particularly 1,3,5-triazine-based compounds, are noteworthy not only for their facile synthesis under mild conditions but also for their broad applications in supramolecular chemistry, pharmaceuticals, and agrochemicals. Building upon the 1,3,5-triazine scaffold, cationic quaternization of *N,N′,N″*-trisubstituted hexahydro-1,3,5-triazinium derivatives introduces significant electronic and structural diversity, enabling new approaches in catalytic transformations and the synthesis of complex nitrogen-containing functional frameworks. In the early development of triazine-based compounds, the quaternization of 1,3,5-triazinium derivatives typically required multistep reactions, generating substantial chemical waste and limiting their practical applicability. Electrochemical synthesis has recently emerged as a greener, low-energy alternative, eliminating the need for excessive oxidants by using electrons as reactants.

In this study, I aim to explore a one-pot oxidative synthesis of *N*-methylbenzylamine derivatives to generate triazinium salts using electrocatalytic methods. This approach offers a potentially milder, more controllable, and sustainable alternative to traditional method. Additionally, a two-step method—first forming the triazinane intermediate and subsequently oxidizing it to the triazinium salt—will be investigated. Comparative analysis with conventional synthetic methods will provide a comprehensive understanding of the efficiency, selectivity, and practicality of these approaches in preparing triazinium-based scaffolds.



Foszfortartalmú hibrid molekulák fejlesztése: vindolin és krizin daganatellenes potenciáljának növelése

Kovács Márton, 12. évf. (középiskolás)
Budai Ciszterci Szent Imre Gimnázium, Budapest

Témavezető: **Halmai Mónika** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

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

A rákos megbetegedések kezelésében jelentős hátráltató szerepe van a daganatos sejtekben kialakuló rezisztenciának és annak, hogy a gyógyszerek többségének csak kevéssé szelektív a hatása. Ezeknek a problémáknak a kiküszöbölésére egy lehetőség hibrid vegyületek használata a kezelésekben.

Kutatásomban az élettanilag sokoldalú krizin rákellenes potenciálját kívántam növelni, ennek érdekében új krizin hibrideket szintetizáltam. Linkerképzőként 1,4-dibrómbutánt, *cisz*-1,4-diklór-2-butént és 4-brómbutánsavat, a krizin hibrid másik biológiailag aktív egységeként (farmakofór) pedig difenilamint, difenilfoszfint, trifenilfoszfint és trisz(4-metoxi-3,5-dimetilfenil)foszfint.

Összességében két új intermedier vegyületet és két hibrid molekulát sikerült előállítanom. A két végtermék a krizin 1,4-dibrómbutánnal történő alkilezésével és ennek az intermedier vegyületnek a difenilfoszfinnal történő reakciójával, illetve a krizin 4-brómbutánsavval acilezett származékának trifenilfoszfinnal történő reakciójával keletkezett. Ezen vegyületek várhatóan daganatellenes hatással rendelkeznek.

Seladelpar intermedierjeinek áramlásos kémiai szintézise 3D-nyomtatott reaktorokban

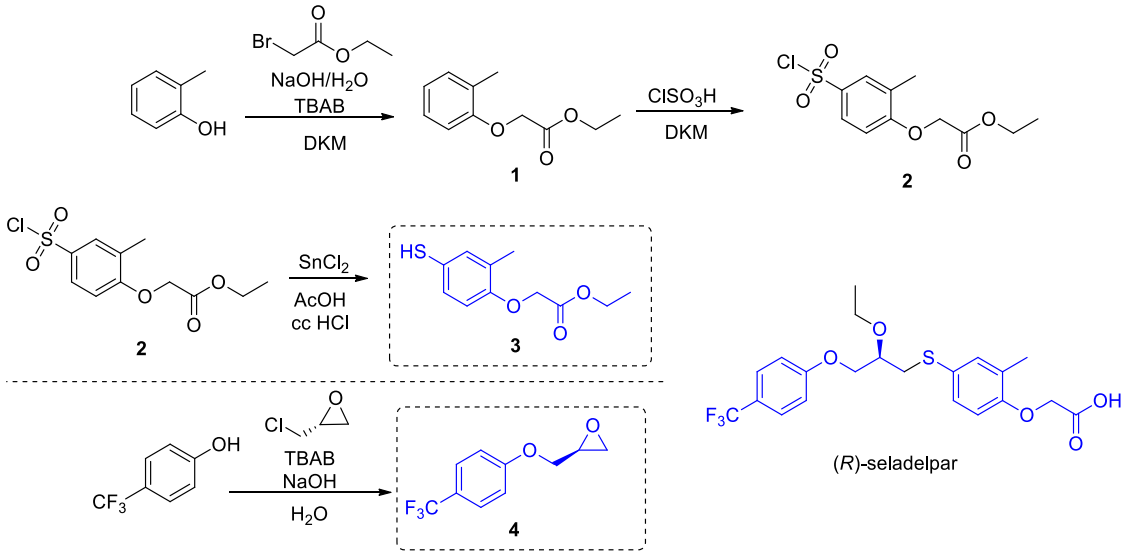
Ferenczi Ákos, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Bálint Erika** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Orosz János Máté** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Napjainkban egyre elterjedtebb az áramlásos kémia, amely a szakaszos reakcióvezetéssel szemben nagyobb termelékenységet, állandó termékminőséget, és biztonságosabb munkavégzést biztosít. A technológia egyik hátránya a szükséges berendezések (pl. reaktorok, fecskendőpumpák, stb.) költsége, ami azonban 3D-nyomtatott reaktorok alkalmazásával jelentősen csökkenthető.

Kutatásom célja a primer biliáris cirrózis kezelésére használt seladelpar gyógyszerhatóanyag két kulcsintermedierjének (**3** és **4**) szintézise 3D-nyomtatott reaktorokban. A két célvegyület előállítását *O*-alkilezési, klórszulfonilezési, valamint redukciós lépéseken keresztül kívántam megvalósítani. A reakciókat először szakaszos reakcióvezetéssel, majd Asia® áramlásos kémiai reaktorban, végül pedig a kutatócsoportunkban tervezett 3D-nyomtatott reaktorokban tanulmányoztam.



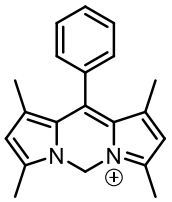
További célul tűztem ki a reakciólépések összekapcsolását in-line feldolgozási módszerek (pl. Zaiput® membránszeparátor) felhasználásával, így egy folyamatos/félfolyamatos előállítási technológiát kívántam kidolgozni. A reakciókat kromatográfiás (GC) és tömegspektrometriás (GC–MS) módszerekkel követtük, a termékeket oszlopkromatográfia segítségével tisztítottuk. Az előállított vegyületek szerkezetét ^{1}H-, ^{13}C- és ^{19}F-NMR-vizsgálatokkal igazoltuk.

CARDIPY fluorofóregységet tartalmazó vegyületek szintézise

Palotai Gitta Dóra, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kovács Ervin** osztályvezető-helyettes
BrainVisionCenter Kft., Biológiai Kémia Osztály
Konzulens: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Domahidy Farkas László vegyészmérnök
BrainVisionCenter Kft., Biológiai Kémia Osztály

A bórdipirrometének (BODIPY-k) egy lenyűgöző tulajdonságokkal bíró festékcsalád, de emellett nagyon lipofilek, ami limitálja a biohasznosíthatóságukat.[1] A karbon-dipirrometének (CARDIPY-k) viszont amellett, hogy rendelkeznek a BODIPY-k pozitív jellemzőivel – többek között nagy fényintenzitással – a kationos jellegük miatt javult vízoldhatóságot és fotostabilitást mutatnak.[2] A probléma viszont, hogy eddig csak rossz termeléssel tudjuk az alapvegyületet előállítani, ezt kívántuk kiküszöbölni.



Először az irodalmi módszert végeztük el, majd optimalizálni kívántuk azt. Utána áttértünk a pirrol-2-karbaldehiddel való reakciókra, ahol az 1,1'-metilénbisz(1*H*-pirrol-2-karbaldehid) intermedieren keresztül igyekeztünk gyűrűt zárni. Ezután az irodalmi módszer inverzét kíséreltük meg, vagyis először a 2,4-dimetilpirrolt trifoszgénnel reagáltattuk THF-ben, különböző körülmények között. Következőleg egy a *mezo*-szénatomon 2-karboxiaril-csoportot tartalmazó származékot kívántunk létrehozni, majd a gyűrűzárást kíséreltük meg. Mindezek mellett a 2,4-difenil-1*H*-pirrolból is elő kívántuk állítani CARDIPY-vegyületeket, így ezt az irodalmi módszer alapján meg is tettük. A reakcióinknál eddig részsikereket értünk el.

Az eddigi tapasztalatok azt mutatják, hogy bizonyos reakcióutakat teljesen elvethetünk, de többnél még vannak felfedezetlen területek.

Referenciák:

[1] Das S, Dey S, Patra S, et al. BODIPY-Based Molecules for Biomedical Applications. *Biomolecules* **2023**, *13*(12), 1723.

[2] Liu J, Guo W, Zhang H, Sun YQ, Liu M. Carbon-dipyrromethenes: Bright cationic fluorescent dyes and potential application in revealing cellular trafficking of mitochondrial glutathione conjugates. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*(40), 17069–17078.

Prolinkatalizált aszimmetrikus Heck-reakció a természetes vegyületek szintézisében

Répási Gergely Balázs, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Soós Tibor** kutatócsoport-vezető
HUN-REN TTK SZKI, Organokatalízis Kutatócsoport
Hegedűs Kristóf tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék

A kauránvázas vegyületek a diterterpének közé sorolható, változatos szerkezetű és igen diverz biológiai hatással rendelkező vegyületcsalád. Egyes tagjai jelentős gyulladáscsökkentő hatást mutatnak és számos rákos sejtvonallal szemben ígéretesnek bizonyultak. Mivel a vegyületek többsége természetes közegben csak igen alacsony koncentrációban fordul elő, izolálásuk sok esetben nem gazdaságos, szintetikus vegyészek feladatává vált előállításuk.

Célkitűzésünk egy olyan szinton előállítása enantioszelektív deszimmetrializálás útján, mellyel eltérő oxidációs mintázatú kauránvázas terpének előállítását tennénk lehetővé méretnövelhető módon, optikailag tiszta formában. Ennek érdekében kutatómunkám során egy csoportunk által fejlesztett enantioszelektív prolin katalizált Heck-reakció optimalizálására és méretnövelésére fókuszáltam. A folyamat során oldószer, hőmérséklet, palládiumforrás, a reakcióban alkalmazott foszfinligandum hatását vizsgáltam a termelésre és az enantiomerfeleslegre nézve. Az eljárást több ponton méretnöveltem.