



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

# **TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA**

**Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar**

**2012**

# **TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA**

**BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar**

**A szekcióülések kezdete: 2012. november 14. 8:30**

**Eredményhirdetés: Ch. C. 14., 2012. november 14. 18:00**



A 2012. évi Tudományos Diákköri Konferenciát  
a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán  
a következő cégek és szervezetek támogatták:

BME Egyetemi Hallgatói Képviselőlet

BME Rektori Hivatal

BME VBK Dékáni Hivatal

BME Tudományos Műhelyek II. - Tehetséggondozás a TDK tevékenységben

(TÁMOP-4.2.2.B-10/1)

Magyar Kémikusok Egyesülete

Pro Progressio Alapítvány

Varga József Alapítvány

Richter Gedeon Nyrt.

Chinoin Zrt.

## ANALITIKAI ÉS FIZIKAI KÉMIA SEKCIÓ

Elnök: **Dr. Horvai György egyetemi tanár**  
Titkár: **Göröcs Noémi PhD. hallgató**  
Koordinátor: **Dr. Baranyai Péter tudományos munkatárs**  
**Dr. Szieberth Dénes posztdoktor**

Helye: K. I. 34.

### **8:30 Görög András**

S-metoprén meghatározása folyadékkromatográfiás módszerrel

*Témavezető:* Dr. Fekete Jenő egyetemi tanár

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

### **8:45 Kaszás Tímea**

Szilárd ZnO-prekurzor minták analitikai (XRD, FTIR) jellemzése és termikus bontásuk fejlődőgáz-analitikai (TG/DTA-MS és TG-FTIR) vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Madarász János egyetemi docens

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

### **9:00 Ecsedi Anita**

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

*Témavezető:* Dr. Horváth Viola tudományos főmunkatárs

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

### **9:15 Rácz Norbert**

Etiléndiamin és etanolamin szuperkritikus szén-dioxid megkötésével képződő ammónium-karbamátjainak analitikai jellemzése és termoanalitikai vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Madarász János egyetemi docens

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

*Konzulens:* Kózelné dr. Székely Edit egyetemi docens

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

### **9:30 Szünet**

### **9:45 Hegyesi Nóra**

Poliaszparaginsav alapú gélek valódi térhálósítási fokának meghatározása

*Témavezető:* Dr. Szilágyi András egyetemi adjunktus

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

*Konzulens:* Gyarmati Benjámin egyetemi tanársegéd

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

**10:00 Terejánszky Péter**

Nanopipetta-alapú érzékelők nanorészecskék számlálására

*Témavezető:* Dr. Gyurcsányi Ervin Róbert egyetemi docens  
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

**10:15 Nagygyörgy Viola**

Gélbe ágyazott, kvázi-szilárd állapotú elektrolitok stabilitásának, ill. változásának termogravimetriás és fejlődőgáz-analitikai (TG/DTA-MS és TG-FTIR) vizsgálata, különös tekintettel a Grätzel-típusú napelemekben alkalmazandó elektrolitkomponensek távozási dinamikájára

*Témavezetők:* Dr. Madarász János egyetemi docens  
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék  
Dr. Pokol György egyetemi tanár  
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

**10:30 Fülöp Gergő**

Arany nanostruktúrák létrehozása irányított önszerveződéssel

*Témavezető:* Dr. Deák András tudományos munkatárs  
MTA TTK – MFA  
*Konzulensek:* Fülöp Eszter PhD. hallgató, tudományos munkatárs  
MTA TTK – MFA  
Dr. Nagy Norbert tudományos munkatárs  
MTA TTK – MFA  
Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi docens  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

**10:45 Szünet**

**11:00 Hunyadi Dávid**

Az ammónium-paravolframát,  $(\text{NH}_4)_{10}[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{42}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , ipari alapanyag alternatív előállításának kifejlesztése

*Témavezető:* Dr. Szilágyi Imre Miklós tudományos munkatárs  
MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport  
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

**11:15 Fódi Tamás**

Piridino-18-korona-6-éter alapú új királis állófázisú kromatográfiás rendszer optimalizálása

*Témavezetők:* Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Balogh György Tibor c. egyetemi docens  
Richter Gedeon Nyrt. Vegyészeti Gyár

*Konzulensek:* Lévai Sándor kutató-fejlesztő  
Richter Gedeon Nyrt. Vegyészeti Gyár  
Dr. Kupai József posztdoktor  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**11:30 Farkas István**

Transzmissziós Raman spektrometria alkalmazása a gyógyszeriparban

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

*Konzulens:* Vajna Balázs doktorjelölt  
Oracle

**11:45 Szabó Réka**

Antibakteriális hatású titán-dioxid bevonatok

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

*Konzulensek:* Dr. Suhajda Ágnes tudományos munkatárs  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék  
Volentiru Emőke PhD. hallgató  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

**12:00 Szabó Gergő**

SiH<sub>3</sub>Cl hidrolízisének vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Nyulászi László egyetemi tanár  
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

## ANYAGTUDOMÁNYI ÉS POLIMERKÉMIA SZEKCIÓ

Elnök: **Dr. Pukánszky Béla** egyetemi tanár  
Titkár: **Tóth Ajna PhD.** hallgató  
Koordinátor: **Bódiné dr. Fekete Erika** tudományos főmunkatárs  
**Dr. Szilágyi Imre Miklós** tudományos munkatárs

Helye: Ch. 308.

### 8:30 **Molnár Kristóf**

Reaktív elektromos szálhúzással előállított mesterséges extracelluláris mátrixok orvosi-biológiai alkalmazásra

*Témavezető:* Dr. Zrínyi Miklós egyetemi tanár  
SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

*Konzulens:* Dr. Jedlovszky-Hajdú Angéla tudományos munkatárs  
SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

### 8:45 **Dabóczi Mátyás**

Szabályozott hatóanyag-leadására alkalmas pórusos szilika alapú modellrendszer fejlesztése

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

*Konzulens:* Dr. Kabai-Faix Márta tudományos tanácsadó  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

### 9:00 **Fekete Tamás**

Cellulóz alapú hidrogélek előállítása és jellemzése

*Témavezető:* Dr. Borsa Judit egyetemi tanár  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

*Konzulens:* Dr. Takács Erzsébet osztályvezető  
MTA Energiatudományi Kutatóközpont, Izotópkutató Intézet

### 9:15 **Solti Katalin**

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

*Témavezető:* Dr. Szilágyi András Ferenc egyetemi adjunktus  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

*Konzulens:* Némethy Árpád tanszéki mérnök  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

### 9:30 **Szünet**

### 9:45 **Kalmár Szabolcs**

Háromkomponensű PP/falaszt/elasztomer kompozitok deformációs mechanizmusa és ütésállósága

*Témavezetők:* Dr. Renner Károly tudományos munkatárs  
MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Dr. Móczó János tudományos főmunkatárs  
MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet



## ANYAGTUDOMÁNYI ÉS POLIMERKÉMIA SZEKCIÓ

### 10:00 Halmi Bence

A kinaldin és 6-cianokinaldin fluoreszcens jelzőmolekulák spektroszkópiai jellemzése

*Témavezető:* Dr. Baranyai Péter tudományos munkatárs  
MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

*Konzulensek:* Dr. Vidóczy Tamás egyetemi magántanár  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék  
Dr. Kubinyi Miklós egyetemi tanár  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

### 10:15 Juriga Dávid

Poli(szukcinimid) és poli(aszparaginsav) gélek mechanikai, duzzadási és degradációs tulajdonságainak vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Zrínyi Miklós egyetemi tanár  
SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

*Konzulens:* Dr. Jedlovszky-Hajdú Angéla tudományos munkatárs  
SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

### 10:30 Sztankovics Andrea

Atmoszférikus hidegplazma kezelés alkalmazása cellulóz alapú szálanyagok felületi tulajdonságainak módosítására

*Témavezetők:* Dr. Csiszár Emília egyetemi docens  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék  
Szabó Orsolya Erzsébet PhD. hallgató  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

*Konzulens:* Dr. Tóth András tudományos főmunkatárs  
MTA Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

### 10:45 Szünet

### 11:00 Horváthová Tímea

Ciklodextrin alapú mikroszálak gyógyszeripari alkalmazása

*Témavezetők:* Dr. Marosi György egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Nagy Zsombor egyetemi tanársegéd  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

*Konzulens:* Víg Tamás PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### 11:15 Németh Csaba

Poliaszparaginsav rezponzív tulajdonságainak módosítása

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

*Konzulens:* Gyarmati Benjámín egyetemi tanársegéd  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

## BIOKÉMIA ÉS ÉLELMISZERTUDOMÁNY SZEKCIÓ

Elnök: **Dr. Sevella Béla egyetemi tanár**  
Titkár: **Tóth Karolina PhD. hallgató**  
Koordinátor: **Dr. Merész Péter egyetemi adjunktus**  
**Bakos Vince egyetemi tanársegéd**

Helye: Ch. A 20.

### **8:30 Molnár Dóra**

Gabona alapú őrlemények reológiai és végtermék tulajdonságainak összehasonlító vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

*Konzulens:* Bucsellá Blanka PhD. hallgató  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### **8:45 Veres-Székely Apor**

SMAD 2 és 3 szerepe a gyulladásos bélbetegség patomechanizmusában

*Témavezető:* Dr. Vannay Ádám laboratóriumvezető  
SE MTA Gyermekgyógyászati és Nefrológiai Kutatócsoport

*Konzulens:* Dr. Szarka András egyetemi docens  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### **9:00 Lovász Krisztina**

A hasadó élesztő G1-fázisú méretkontrolljának vizsgálata matematikai modellezéssel

*Témavezető:* Dr. Sveiczter Ákos egyetemi docens  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### **9:15 Koványi Bence**

A P2X7 purin receptorok szerepe a génexpressziós változásokban a szkizofrénia fenciklidin indukált állatmodelljében

*Témavezető:* Dr. Sperlágh Beáta tudományos igazgató helyettes  
MTA-KOKI Molekuláris farmakológia Kutatócsoport

*Konzulens:* Dr. Deák Veronika egyetemi adjunktus  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### **9:30 Szünet**

### **9:45 Vodicska Barbara**

Egy membránfehérje a sejtmagban

*Témavezető:* Dr. Welker Ervin laboratóriumvezető  
MTA TK MFI Prion- és Fehérjekonformációs Betegségek  
Laboratórium

*Konzulens:* Nyeste Antal PhD hallgató  
MTA TK MFI Prion- és Fehérjekonformációs Betegségek  
Laboratórium

## BIOKÉMIA ÉS ÉLELMISZERTUDOMÁNY SZEKCIÓ

### 10:00 Kádár Veronika

Represszió - derepresszió elven működő molekuláris kapcsoló karakterizálása *Staphylococcus aureus*-ban

*Témavezető:* Dr. Németh Veronika tudományos munkatárs  
MTA TTK Enzimológiai Intézet

*Konzulens:* Dr. Vértessy G. Beáta egyetemi tanár  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### 10:15 Nagy Mariann

Újonnan fejlesztett funkcionális búzaőrlemény és egyéb, hagyományosnak tekinthető gabonaőrlemények táplálkozástanai értékének összehasonlító vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

*Konzulens:* Bucsella Blanka PhD. hallgató  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### 10:30 Dülk Metta

A dehidroaszorbát és az elektrontranszport lánckapcsolatának vizsgálata  $\rho^0$  sejtekben

*Témavezető:* Dr. Wunderlich Lívius egyetemi adjunktus  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### 10:45 Szünet

### 11:00 Kirsch Klára

Döntéshozó rendszer fejlesztése rákos betegek molekulárisan célzott egyénre szabott terápiájához

*Témavezető:* Dr. Peták István tudományos igazgató  
KPS Biotechnológiai és Egészségügyi Szolgáltató Kft.

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

### 11:15 Hámornik Gábor Bence

Másodlagosan keletkező glutamát kimutatása és hatása in vitro neurotoxicitási tesztekben

*Témavezetők:* Dr. Herberth Balázs tudományos főmunkatárs  
EGIS Gyógyszergyár Nyrt.  
Kaufmanné Bojti Erzsébet fejlesztő analitikus  
EGIS Gyógyszergyár Nyrt.

*Konzulens:* Dr. Deák Veronika egyetemi adjunktus  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### 11:30 Izsó Eszter

Gabonák malmi frakcióinak vizsgálata infravörös spektroszkópiai és mikroszkópiai módszerekkel

*Témavezető:* Dr. Gergely Szilveszter egyetemi adjunktus  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

*Konzulens:* Dr. Salgó András egyetemi tanár  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

## BIOTECHNOLÓGIA SEKCIÓ

Elnök: **Dr. Salgó András egyetemi tanár**  
Titkár: **Balázs Gábor PhD. hallgató**  
Koordinátor: **Dr. Molnár Mónika egyetemi adjunktus**  
**Dr. Németh Áron egyetemi adjunktus**

Helye: Ch. A. 21.

### **8:30 Eller Nikolett**

Biofilm alapú szennyvíztisztító rendszer és matematikai modelljének vizsgálata, modellparaméterek meghatározása

*Témavezető:* Szilágyi Nikolett okleveles környezetmérnök  
Organica Technológiák Zrt.

*Konzulens:* Dr. Csikor Zsolt egyetemi docens  
Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

### **8:45 Gubicza Krisztina**

Mezőgazdasági melléktermékek enzimes hidrolízise és a folyamat kinetikai modellje

*Témavezető:* Dr. Barta Zsolt egyetemi tanársegéd  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### **9:00 Abaháziová Emese**

Szilikagélek felületmódosítása és alkalmazása lipázok szelektív adszorpciójára

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

*Konzulens:* Boros Zoltán PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### **9:15 Torma Csilla Zsófia**

Nagy szervesanyag-tartalmú gyógyszeripari hulladékvizek biológiai ártalmatlanítása és hasznosítása

*Témavezető:* Dr. Tardy Gábor Márk egyetemi adjunktus  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### **9:30 Szünet**

### **9:45 Gál Boglárka**

Kukoricarost arabinóz tartalmának hidrolízise kémiai és biokémiai módszerekkel

*Témavezető:* Dr. Barta Zsolt egyetemi tanársegéd  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

*Konzulens:* Fehér Csaba PhD. hallgató  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

## BIOTECHNOLÓGIA SZEKCIÓ

### 10:00 Nagy Flóra

Terner szol-gél rendszerekbe rögzített lipázok szisztematikus optimalizálása és felhasználhatósága

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

*Konzulens:* Weiser Diána PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### 10:15 Tobak Teodóra

Új gyógyszer- technológiai eljárások fejlesztése probiotikumok szilárd formulálására és stabilizálására

*Témavezetők:* Dr. Marosi György egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Suhajda Ágnes tudományos munkatárs  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

*Konzulensek:* Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi tanársegéd  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Wagner István PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### 10:30 Kisfaludy Anna Márta

Termofil fonalas gombák tenyésztésének optimalizálása

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

*Konzulensek:* Dr. Bódai Viktória kutatási vezető  
Fermentia Kft.  
Boros Zoltán PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

## KÉMIAI TECHNOLÓGIA ÉS VEGYIPARI MŰVELETEK SEKCIÓ

Elnök: **Dr. Petneházy Imre** egyetemi magántanár  
Titkár: **Tonkó Csilla PhD.** hallgató  
Koordinátor: **Dr. Benkő Tamás** egyetemi adjunktus  
**Dr. Rapi Zsolt** tudományos segédmunkatárs

Helye: Ch. 205.

### **8:30 Balogh Attila**

Olvadék alapú elektrosztatikus szálképzés alkalmazása a gyógyszer technológiában

*Témavezetők:* Dr. Marosi György egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Nagy Zsombor egyetemi tanársegéd  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### **8:45 Tajti Ádám**

Foszfónátok és foszfinátok alkoholízise mikrohullámú körülmények között

*Témavezető:* Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
*Konzulens:* Bálint Erika PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### **9:00 Zsóka Péter**

Antivirális hatóanyag-tartalmú gyógyszerkészítmény fejlesztése és biofarmáciai vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Marosi György egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
*Konzulens:* Dr. Máthé Tibor TFO osztályvezető  
TEVA Gyógyszergyár Zrt.

### **9:15 Géczy Nikoletta**

Fertőzés gátlás cukorcirok mikroszűrése esetén

*Témavezető:* Dr. Cséfalvay Edit egyetemi adjunktus  
BME Kémiai és Folyamatmérnöki Tanszék  
*Konzulens:* Dr. Suhajda Ágnes tudományos munkatárs  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

### **9:30 Szünet**

### **9:45 Szigeti Szilvia**

Carvedilol kristályosítása segédanyagokkal

*Témavezető:* Dr. Marosi György egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
*Konzulens:* Pataki Hajnalka PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**10:00 Lévai György**

Butoxi - etanol és diaceton - alkohol CO<sub>2</sub>-os oldatainak nagynyomású fázisegyensúlyi mérése és viszkozitásainak becslése

*Témavezető:* Kózelné dr. Székely Edit egyetemi docens  
BME Kémiai és Folyamatmérnöki Tanszék

*Konzulens:* Dr. Simándi Béla egyetemi tanár  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

**10:15 Nagy Dávid Illés**

Biszfoszfonátok szintézisének vizsgálata

*Témavezetők:* Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Grün Alajos egyetemi adjunktus  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

*Konzulens:* Kovács Rita PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**10:30 Györffy Péter Ákos**

Oldószerregeneráló oszlop tervezése

*Témavezető:* Dr. Busa Csilla Head of Process Engineering  
Sanofi

*Konzulensek:* Dr. Kemény Sándor egyetemi tanár  
BME Kémiai és Folyamatmérnöki Tanszék  
Vörös Attila gyakornok  
Sanofi

**10:45 Szünet**

**11:00 Szternácsik Klaudia**

A fűrészpálma (*Serenoa repens*) kivonatok hatóanyagainak vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Simándi Béla egyetemi tanár  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

**11:15 Szőke-Molnár Kristóf**

Hordozós nemesfém-katalizátorok mérgeződésének és visszaforgathatóságának vizsgálata *N*-metilpirrol hidrogénezésében

*Témavezető:* Dr. Hegedűs László tudományos főmunkatárs  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**11:30 Kovács Tamara**

Alkil-foszfolén ligandumokat tartalmazó komplexek előállítása, és alkalmazásuk katalitikus reakcióban

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

*Konzulens:* Bagi Péter PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**11:45 Lőrincz László**

Diasztereomersók kristályosítása szuperkritikus antiszolvens technológiával

*Témavezető:* Kózelné dr. Székely Edit egyetemi docens  
BME Kémiai és Folyamatmérnöki Tanszék

*Konzulens:* Bánsághi György PhD. hallgató  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

**12:00 Baán Adrienn**

Sebgyógyulást elősegítő nanoszálás gyógyszerkészítmények fejlesztése

*Témavezetők:* Dr. Marosi György egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Nagy Zsombor egyetemi tanársegéd  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék



## SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ

Elnök: **Dr. Novák Lajos professor emeritus**  
Titkár: **Sóti Péter Lajos PhD. hallgató**  
Koordinátor: **Dr. Hegedűs László tudományos főmunkatárs**  
**Dr. Hell Zoltán egyetemi docens**

Helye: Ch. C. 14.

### **8:30 Somogyi Dániel**

Fenoxiecetsav észterek alkalmazása a 2-benzilpropán-1,3-diol enzimkatalizált aszimmetrikus biotranszformációjában

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

*Konzulens:* Boros Zoltán PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### **8:45 Pál Dávid**

Fentiazin egységet tartalmazó szenzormolekulák szintézise és anionfelismerő-képességük vizsgálata

*Témavezető:* Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

*Konzulensek:* Dr. Móczár Ildikó egyetemi tanársegéd  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Kormos Attila doktorjelölt  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### **9:00 Kovács Dániel**

Anellált pirazolo-kinazolinok előállítása

*Témavezető:* Dr. Molnár-Tóth Judit kutató  
Servier Kutatóintézet Zrt.

*Konzulensek:* Dr. Nyerges Miklós osztályvezető  
Servier Kutatóintézet Zrt.  
Dr. Hornyánszky Gábor egyetemi docens  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### **9:15 Örkényi Róbert Zoltán**

3-Alkoxi-6,6-dihalo-3-foszfabiciklo[3.1.0]hexán-3-oxidok szintézisének vizsgálata

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

*Konzulensek:* Dr. Grün Alajos egyetemi adjunktus  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Kiss Nóra Zsuzsa PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### **9:30 Szünet**

## SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ

### 9:45 Csuka Pál

Optikailag aktív potenciális tirozin kináz inhibitorok kemoenzimátikus szintézise

*Témavezetők:* Dr. Hornyánszky Gábor egyetemi docens  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Poppe László egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

*Konzulens:* Boros Zoltán PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### 10:00 Sári Éva

Várhatóan bioaktív fenantridon alkaloid analogonok köztitermékeinek előállítására szubsztituált benzilidénacetonekból

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

### 10:15 Lengyel Zsófia

Galantamin intermedierek és származékok szintézise

*Témavezetők:* Dr. Hazai László egyetemi magántanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Szántay Csaba professor emeritus  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### 10:30 Németh Tamás

Enantiomertiszta akridino-18-korona-6-éter szelektort tartalmazó királis állófázisok előállítása és vizsgálata

*Témavezetők:* Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Dr. Tóth Tünde egyetemi adjunktus  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### 10:45 Szünet

### 11:00 Szokol Bianka

*N*-Allil- $\beta$ -laktám származékok előállítása és oxidatív transzformációja

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

*Konzulens:* Komjáti Balázs PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### 11:15 Oláh Márk

*Pseudozyma aphidis* lipáz aktivitásának vizsgálata racém aminok enzimkatalizált kinetikus rezolválásában

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

*Konzulens:* Boros Zoltán PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

## SZERVES KÉMIA SEKCIÓ

### 11:30 Ilkei Viktor

A (-)-bannucin és a (-)-5'-epibannucin első szintézise. A szén-szén kötés egyszerű kialakítása.

*Témavezető:* Dr. Kalas György professor emeritus  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

### 11:45 Nagy-Győr László

Biodízel újszerű alkalmazása oldószermentes enzimkatalizált kinetikus rezolválásokban

*Témavezető:* Dr. Poppe László egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
*Konzulens:* Boros Zoltán PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**A DOLGOZATOK  
ÖSSZEFOGLALÓI**



## S-metoprén meghatározása folyadékkromatográfiás módszerrel

Görög András BSc. III. évfolyam

Témavezető: **Dr. Fekete Jenő** egyetemi tanár  
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A módszer kidolgozására azért került sor, hogy a biológiai kísérleteknél a vízben az S-metoprén valódi koncentrációját mérni lehessen. A fenti eredmények alapján az S-metoprén meghatározása vízmintából ppb szinten lehetővé vált, ezzel hozzájárultunk a toxikológiai mérések sikerességéhez. A kidolgozott folyadék-folyadék extrakciós módszer alkalmazása sikeres volt. A módszerrel ezután már megbízhatóan mérhető az anyag koncentrációja a határérték alatt is. A szakirodalomban kevés meghatározási módszert lehet találni, azok pedig nem veszik figyelembe az S-metoprén magas logP értékét. Az általam kidolgozott módszerrel viszont alacson koncentrációsinten is reprodukálhatóan, és közel 100%-os visszanyeréssel lehet meghatározni az anyagot. Az elővalidálás során a módszerrel szelektíven sikerült elválasztani az S-metoprént, nagy érzékenységgel. A beállított paraméterekkel az anyag átlagos retenciós ideje 5,83 perc, ami megfelelő sebességű méréseket biztosít. A kimutatás alsó határa 6 fg/mL, a mennyiségi meghatározás alsó határa pedig 20 fg/mL. Az elővalidálás során robusztussági vizsgálatot is végeztem, melynek során a mozgófázis összetételét változtattam, illetve egy másik kolonnán is alkalmaztam a módszert. A holtidő meghatározása után kiszámítottam a módszer analitikai teljesítményjellemzőit. Az átlagos visszatartás (2,65) és az átlagos elméleti tányérszám is megfelelő (8000). A vizsgált minta 20% metanol - 80% víz térfogatarányú elegyben hűtőben és szobahőmérsékleten tárolva is 5 napig stabil maradt. A kidolgozott módszer a gyakorlatban is alkalmazásra került.

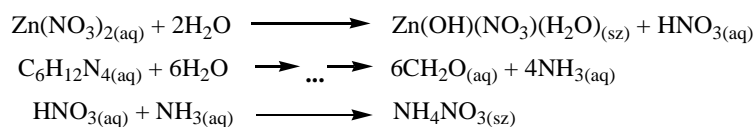
## Szilárd ZnO-prekurzor minták analitikai (XRD, FTIR) jellemzése és termikus bontásuk fejlődőgáz-analitikai (TG/DTA-MS és TG-FTIR) vizsgálata

Kaszás Tímea MSc. II. évfolyam

Témavezető: **Dr. Madarász János** egyetemi docens  
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

Nanorészecskés ZnO-ot, különösen vékonyréteg formájában számos területen pl.: festékekkel érzékenyített fotovoltaiikus (napelem) cellákban alkalmazni kívánják [1]. A ZnO előállítására romániai kollégáink pl. különféle ZnO prekurzorok oldatába mártottak egy speciális üveglapot, amelyre feltapadó nedves filmrétegeket szárították 400-500°C-on [2]. Készítettek ZnO prekurzorokat cink-nitrát-tetrahidrát és cink-acetát-dihidrát cinksókat reagáltatva hexametiléntetraminnal 4:1, valamint trietanolaminnal 5:1 mólarányt alkalmazva vizes, illetve etanolos közegben. A termékeket bepárolták. Ezeket a mintákat hozták el analitikai jellemzésre és termoanalitikai vizsgálatra. Ebbe a munkába kapcsolódtam be.

A por-röntgendiffrakciós fáziselemzésekhez (XRD) az ICDD PDF4+ nemzetközi adatbázis referenciáival hasonlítottam össze a mintákról készített diffraktogramokat. Ezek alapján cink-nitrát-tetrahidrát hexametiléntetraminnal (HMTA) vizes közegben végzett reakciójában 60 °C-on nyert, 80° C-on bepárolt terméket tovább vizsgáltam részletesebben. A prekurzorban a reagensekből hidrolízissel nyerhető vegyületeket, cink-hidroxi-nitrát-hidrátot [Zn(OH)(NO<sub>3</sub>)(H<sub>2</sub>O)] és ammóium-nitrátot (NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>) azonosítottam. Az ammónium-nitrát jelenléte a HMTA hidrolízisével és savkatalízis hatására történő fokozatos bomlásával magyarázható. A HMTA bomlásának végtermékei ammónia és formaldehid, utóbbi részben elillanhat, illetve amorf anyaggá (pl.: paraformaldehiddé) polimerizálódhat. A lejátszódó folyamatok:



A prekurzor mintában jelenlevő kristályos Zn(OH)(NO<sub>3</sub>)(H<sub>2</sub>O) komponens ekvimoláris jelenléte és korai bomlása jelentősen befolyásolni látszik a tiszta ammónium-nitrát ismert termikus viselkedését (TG/DTA). A fejlődő gázok TG-FTIR- és TG/DTA-MS-spektrumaiban megjelenő abszorpciós sávok, ill. fragmentumok alapján a következő gázokat/gőzöket tudtam referencia IR- és MS-spektrumaik alapján azonosítani: H<sub>2</sub>O<sub>(g)</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>(g)</sub>, NO<sub>2(g)</sub>, HNO<sub>3(g)</sub>, NH<sub>3(g)</sub> és CO<sub>2(g)</sub>. A felsorolt első négy légnemű anyag, ellenőrzésül végzett hasonló kísérleteim szerint, a tiszta ammónium-nitrátból is képződik, míg a széndioxid megjelenését egy kevés szerves anyag (pl. paraformaldehid) keletkezésével és kiégésével magyarázhatjuk.

1. Sima, M.; Vasile, E.; Sima, M *Thin Solid Films*, **2012**, 520 (14), 4632–4636.
2. Mihaiu, S.; Gartner, M.; Voicescu M.; Gabor, M.; Mocioiu O.; Zaharescu, M. *Optoelectronics and Advanced Materials: Rapid Communications*, **2009**, 3 (9), 884–890.

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

Ecsedi Anita BSc. IV. évfolyam

Témavezető: **Dr. Horváth Viola** tudományos főmunkatárs  
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

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



## Etiléndiamin és etanolamin szuperkritikus szén-dioxid megkötésével képződő ammónium-karbamátjainak analitikai jellemzése és termoanalitikai vizsgálata

Rácz Norbert BSc. IV. évfolyam

Témavezető: **Dr. Madarász János** egyetemi docens

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Közelné dr. Székely Edit** egyetemi docens

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Első és másodrendű aminok széndioxid megkötésével ammónium-karbamát típusú ionos vegyületekké alakulhatnak. Az etiléndiamin ('en') esetén egyenesen ikerionos szilárd só keletkezése várható, mivel a szakirodalomban két kristályos módosulatát is leírták. Etanolamin (2-aminoethanol, 'ea') ammónium-karbamát típusú szilárd vegyületét eddig még nem említették, viszont az etanolaminos vizes oldatokat füstgázok széndioxid-tartalmának ellenáramú extrakciós műveletben végzendő csökkentésére ipari méretű alkalmazásokat is javasoltak, ahol az aminok termikus regenerációval történő visszanyerése a széndioxid újra felhasználása mellett is megfontolandó lépés lehetne.

Munkám során a fenti két elsőrendű amin ammónium-karbamát típusú sójának (az etanolammónium-etanolamin-karbamátnek  $[eaH]^+[ea\_CO_2]^-$  és az ikerionos etiléndiamin-karbamátnek  $[en\_CO_2]$ ) előállítását és termikus stabilitásának vizsgálatát tűztem ki célul. A vegyületek előállítására szuperkritikus széndioxidot használtam, amit egy nyomás- és hőmérséklet szabályozott reaktorban reagáltattam a kiindulási folyadék aminnal. Míg az etiléndiamin esetén szilárd termékeket nyertem (s.g. 33-as térszerkezetű rombos kristályos vegyületet), addig az etanolamin esetén viszkózus folyadékot. Ezeket a termékeket Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiával (FTIR) és por-röntgendiffrakciós módszerrel (XRD) vizsgáltam meg, és referencia spektrumok, ill. diffrakciós képek alapján igyekeztem azonosítani, így a folyékony etanolammónium-etanolamin-karbamátként ( $[eaH]^+[ea\_CO_2]^-$ ) ionos folyadékot sikerült kapnom. Az „en” és „ea” aminmolekulára vonatkoztatottan egy, ill. fél széndioxid molekulát megkötött termékek stabilitását, termikus bomlását szimultán termogravimetriás és differenciál-termoanalízises (TG/DTA) berendezésben vizsgáltam, illetve egyidejűleg a termomérlegekhez kapcsolt kvadrupól tömegspektrométerrel (TG/DTA-MS) és Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiás gázcella (TG-FTIR) segítségével fejlődőgáz-elemzéseket (EGA) is végrehajtottam. Azt találtam, hogy az ikerionos  $en\_CO_2$ -ra egylépcsős bomlás jellemző, függetlenül a tégely típusától (nyitott platina vagy zárt, de túvel kilyukasztott alumínium) és a bemérési tömegtől. Ezzel szemben az “ionos folyadék”  $[eaH]^+[ea\_CO_2]^-$  mintánál a két tégelyben eltérő dinamikát mutat a TG görbe. Míg a nyitott Pt-tégelyben az  $en\_CO_2$ -hoz hasonlóan egylépcsős bomlás észlelhető, addig a zárt tégelyben az etanolamin forrponthoz közel (valószínűleg katalitikus) krakkolódás és átmeneti kátrányosodás következik be, és mivel az új kondenzált köztes termékek az emelkedő hőmérséklet hatására már tovább is degradálódnak, a tömegvesztés-dinamikája lelassul, furcsa változásokat mutat, törések (hullámvások) keletkeznek a TG(DTG) görbéken, így a kapcsolt EGA-FTIR spektroszkópiás integrált abszorbancián alapuló  $CO_2$ - és szervesgőz-fejlődésmentek szétválnak, sőt az EGA-MS spektrumokban megjelennek nagyobb szénatomszámú komponensek is.

## Poliaszparaginsav alapú gélek valódi térhálósítási fokának meghatározása

Hegyesi Nóra MSc. II. évfolyam

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

Konzulens: **Gyarmati Benjámín** egyetemi tanársegéd  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Az elmúlt években egyre szélesebb körben kezdődött meg a polimer alapú hidrogélek kutatása. A megfelelő polimerváz megválasztásával környezeti paraméterekre (pl.: pH, hőmérséklet) érzékeny biokompatibilis rendszerek alakíthatóak ki, melyek külső hatásra egy előre programozott módon változtatják fizikai és kémiai tulajdonságaikat, leggyakrabban a térfogatukat. A polimer gélek tulajdonságait a felépítő polimer molekulák minősége, molekulatömege, valamint a polimer molekulák közötti kialakuló fizikai és kémiai kölcsönhatások határozzák meg. A fizikai kölcsönhatások száma statisztikusan állandó, de a polimer molekulák folyamatos mozgásának köszönhetően helyük állandóan változik. Ezzel szemben a térhálóban található kovalens kötéssel kialakított kémiai térhálópontok helye állandó.

Kutatómunkám során diaminokkal utólagosan térhálósított poliaszparaginsav hidrogélek kémiai térhálópont-sűrűségének meghatározására dolgoztam ki módszert.[1] Meghatároztam a gélesedés alatt a polimerrel nem reagáló, illetve csak egyik aminocsoportjával kapcsolódó térhálósító molekulák számát. Ehhez a primer aminocsoportokkal szelektíven reagáló 2,4,6-trinitrobenzol-szulfonsavat (TNBS) használtam. A TNBS enyhén lúgos közegben, gyors reakcióban  $S_N2A_r$  mechanizmus szerint reagál a primer aminocsoportot tartalmazó molekulákkal, az így kapott sárgaszínű reakciótermék UV-VIS spektroszkópia segítségével mérhető. A származékképzéssel párhuzamosan, az enyhén lúgos közegben jóval lassabban megtörténik a TNBS hidrolízise is. Ez gyors mérések esetén nem zavarja az analízist.[2]

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

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

### Referenciák:

- [1] Gyenes T, Torma V, Gyarmati B, Zrinyi M. Synthesis and swelling properties of novel pH-sensitive poly(aspartic acid) gels. *Acta Biomaterialia* 2008;4:733-44.
- [2] Kiranas ER, TzouwaraKarayanni SM, Karayannis MI. The reaction of glutamic acid and trinitrobenzenesulfonic acid-kinetic study and analytical application. *Talanta* 1997;44:1113-21.

## Nanopipetta-alapú érzékelők nanorészecskék számlálására

Terejánszky Péter MSc. II. évfolyam

Témavezető: **Dr. Gyurcsányi Ervin Róbert** egyetemi docens  
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A nanoszerkezeteken alapuló meghatározásokat a bioanalitika legérzékenyebb módszerei között tartják számon, sok esetben ugyanis lehetővé teszik az érzékelési folyamat molekuláris szintű kontrollját, és akár egyetlen molekula<sup>1</sup> detektálásához szükséges érzékenységet. Ilyen tulajdonságokkal bírnak a nanopórusos érzékelők is,<sup>2, 3</sup> amelyek kifejlesztését a sejtmembránba ágyazott ionsatornák működési mechanizmusa inspirálta. A nanopórusos érzékelés egyik legperspektivikusabb területét a biológiai és szintetikus eredetű nanorészecskék meghatározása képezi. Ezen a területen munkám célkitűzése olyan szintetikus nanopórusok előállítására volt, amelyek alkalmasak nanorészecskék méretének és koncentrációjának meghatározására. Ennek érdekében kvarc kapillárisokból mikro- és nanopipettákat állítottam elő, amelyek egyetlen, kónusz-alakú pórust tartalmaztak. A javasolt eljárással igény szerinti méretben, páratlan egyszerűséggel és költséghatékonysággal állíthatók elő nanopórus érzékelők. Ezek kialakításához 200 nm és 6 µm közötti átmérőjű kvarcpipettákat készítettem, amelyeket elektrolittal töltöttem fel és egy Ag/AgCl referencia elektródot tartalmazó pipetta befogóba illesztettem. A számlálási kísérleteknél a pipettákat a mintaoldatba merítettem, majd a minta- és belső oldatba merülő referencia elektródok között, konstans feszültség mellett, a póruson átfolyó áramot mértem. A póruson áthaladó nanorészecskék a térfogatukkal megegyező, nagy vezetőségű elektrolitot kiszorítva a pórusból tranziens pórusellenállás növekedést, karakterisztikus áram pulzusokat eredményeztek. Ezeknek a pulzusoknak a frekvenciája a részecske koncentrációval, míg az amplitúdójuk a részecskék méretével volt arányos. Kísérleteimben úgy találtam, hogy a részecskeszámlálás leghatékonyabb módja, hogy hidrosztatikai nyomáskülönbség alkalmazásával áramoltassam a nanorészecskéket tartalmazó oldatot a póruson keresztül. Amennyiben a nanorészecskék felületi töltéssel rendelkeznek, a számlálási frekvenciát nagyban befolyásolta az alkalmazott feszültség polaritása és nagysága is. Ezeket a tendenciákat vizsgáltam különböző méretű gömb alakú nanorészecskékkel megfelelő méretű pórusokat alkalmazva. A részecskeszámlálás legkritikusabb problémája - a nanorészecskék aggregációja a pórus környezetében - elkerülése végett optimaltam a számlálás kísérleti körülményeit. Összefoglalásként, kidolgoztam az első nanopipetta alapú számlálókat és eljárásokat, amelyek lehetőséget adtak gömb alakú polimer részecskék mennyiségi meghatározására 60 nm és 2 µm-es átmérő között, továbbá akár egymástól kevéssé eltérő méretű nanorészecskék megkülönböztetésére az áram pulzusok amplitúdói és időtartamai alapján.

1. L. Höfler and R. E. Gyurcsányi, *Analytica Chimica Acta*, 2012, **722**, 119-126.
2. G. Jágerszki, Á. Takács, I. Bitter and R. E. Gyurcsányi, *Angewandte Chemie-International Edition*, 2011, **50**, 1656-1659.
3. R. E. Gyurcsányi, *Trac-Trends in Analytical Chemistry*, 2008, **27**, 627-639

**Gélbe ágyazott, kvázi-szilárd állapotú elektrolitok stabilitásának, ill. változásának termogravimetriás és fejlődőgáz-analitikai (TG/DTA-MS és TG-FTIR) vizsgálata, különös tekintettel a Grätzel-típusú napelemekben alkalmazandó elektrolitkomponensek távozási dinamikájára**

**Nagygyörgy Viola MSc. I. évfolyam**

Témavezetők: **Dr. Madarász János** egyetemi docens

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

**Dr. Pokol György** egyetemi tanár

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

A festékkel érzékenyített (Dye-Sensitized Solar Cell, DSSC) vagy másnéven Grätzel-típusú napelemek fejlesztésével több kutatócsoport is foglalkozik. Görög együttműködő kollégáink speciális térhálós gélbe zárt, apoláris oldószerben oldott KI/I<sub>2</sub> tartalmú, különböző összeállítású „kvázi-szilárd” elektrolitokat javasoltak a szivárgások esélyének csökkentésére. Kétféle gélpolymer mintát bocsátottak rendelkezésünkre, hogy azok stabilitását, ill. változását közönséges körülmények közötti tárolás során (szobahőmérséklet, napsütés mellett) hosszabb időtartományban teszteljük. A két gélpolymer térhálójának alapját az Ureasil 230 és az Ureasil 2000 vegyületek adták, a mintáink rendre P2 (U230) és a P4 (U2000) jelűek.

A vizsgálati módszerünk lényege, hogy az illékony elektrolit komponensekben bekövetkező veszteségek mértékét termogravimetriásan (TG) határozzuk meg, továbbá ezeket és a polimerháló termikus degradációjakor keletkező légnemű termékeket fejlődőgáz-analitikai [termomérlegekhez online kapcsolt kvadrupol tömegspektrométer (TG/DTA-MS) ill. Fourier-transzformációs infravörös gázcellás (TG-FTIR)] mérőműszerekkel kíséreltük meg nyomon követni és azonosítani a fellelhető referencia MS- és IR-spektrumaik segítségével.

Áramló levegőben, 9-11 havonta végzett termogravimetriás mérések során a végső (500°C) kihevítési maradék mennyiségét olvastam le az elmúlt 3 évben. Mindkét mintánál számottevő szilárd maradék keletkezett, a kapott fehéres porban röntgendiffrakcióval kristályos főkomponensként kálium-jodidot azonosítottam, amit amorf szilikagél is kísérhetett. Együttes %-os arányuk mind a négy mérési időpontban közel azonos volt, mutatva hogy a P4 minta stabil volt a tárolási körülmények között, viszont a P2 minta növekvő nem-illékony maradékának arányából az illékony komponensek részbeni elvesztésére következtethettem. Ez a tárolás alatti változás arra utalt, hogy a P2 minta stabilitása az eltelt idő alatt rosszabb volt, mint a P4 mintáé.

Az illó komponensek gázkeverékbeli azonosítását infravörös- (TG-EGA-FTIR) és tömegspektrumaik alapján, azokat a TG/DTG/DTA görbék változásaival összhangban követve végeztem el. Mindkét minta esetében sikerült azonosítani a mérés indításakor kis mennyiségben távozó etil-acetátot, valamint ecetsavat, szulfolánt (tetrametil-szulfon) és szén-dioxidot. A minták közötti különbség a polimerháló bomladozásának megkezdődése után (T>300°C) mutatkozott meg. A P2 mintánál ammóniát, metánt valamint egy karbonil vegyületet észleltünk, viszont a P4 minta esetében szén-monoxidot és formaldehidet sikerült azonosítani. A tömegspektrumok elemzése megerősítette az FTIR-spektrumokból meghatározott összes komponens fejlődését, valamint sikerült kimutatni jódot és rövid láncú alkil-jodidokat is.

Tehát a két minta közötti 3D-térhálóbeli különbsége az illékony komponensek visszatartásában különbséget okoz, azaz a rövidebb összekötő egységet tartalmazó P2 minta közönséges körülmények között évekig tárolva illékonyanyag-tartalmából fokozatosan veszít, míg a hosszabb láncú távtartót tartalmazó P4 minta számottevően nem. A két minta között termikus bomlásbeli különbség is jól észlelhető volt, amikor a térhálójuk eltérő vegyületekre, fragmensekre bomlott, ill. égett el.

## Arany nanostruktúrák létrehozása irányított önszerveződéssel

Fülöp Gergő BSc. IV. évfolyam

Témavezető: **Dr. Deák András** tudományos munkatárs

MTA TTK - MFA

Konzulensek: **Fülöp Eszter** PhD. hallgató, tudományos munkatárs

MTA TTK - MFA

**Dr. Nagy Norbert** tudományos munkatárs

MTA TTK - MFA

**Dr. Hórvölgyi Zoltán** tudományos dékánhelyettes, egyetemi docens

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

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

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

**Az ammónium-paravolfamát,  $(\text{NH}_4)_{10}[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{42}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , ipari alapanyag  
alternatív előállításának kifejlesztése**

**Hunyadi Dávid MSc. I. évfolyam**

Témavezető: **Dr. Szilágyi Imre Miklós** tudományos munkatárs  
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az ammónium-paravolfamát (ammonium paratungstate, APT),  $(\text{NH}_4)_{10}[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{42}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  a volfrámgyártás (56700 tonna/év) legfontosabb alapanyaga, melyet a keményfémgyártásban és a fényforrásiparban is használnak. Ezen kívül az APT több más terméknek is kiindulási anyaga, melyek közül a legfontosabb a  $\text{WO}_3$  (katalízis, fotokatalízis, gázérzékelés). Az APT nedves kémiai úton történő előállítása többlépéses és pH érzékeny. TDK munkám célja az APT teljesen új, egyszerűbb előállításának kidolgozása szilárd-gázfázisú heterogén reakcióval.

A  $\text{WO}_3$  és  $\text{NH}_3$  közötti reakciót úgy végeztem, hogy egy lezárt reaktorba szobahőmérsékleten  $\text{WO}_3$  port és  $\text{NH}_3$  oldatot helyeztem, melyek csak gázfázisban tudtak érintkezni. Vizsgáltam a  $\text{WO}_3$  minták szemcseméretének, kristályszerkezetének (hexagonális, monoklin) és az összetételének (oxidált, részlegesen redukált) hatását. Az  $\text{NH}_3$  parciális nyomását az  $\text{NH}_3$  oldatok koncentrációjával (13 M, 6 M, 1 M, 0,5 M, 0,1 M) szabályoztam. A volfrám-oxidok átalakulását por-röntgendiffrakciós (XRD), Fourier transzformációs infravörös spektroszkópiai (FTIR), Raman spektroszkópiai mérésekkel, valamint pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM), transzmissziós elektronmikroszkópiával (TEM-ED) és termikus analízissel (TG/DTA-MS) követtük nyomon.

Tömény (13 M, 6 M)  $\text{NH}_3$  oldatok esetén már órákon belül történt reakció. A nagy parciális nyomású  $\text{NH}_3$  gáz először redukálta a  $\text{WO}_3$ -mat, és így részlegesen redukált fázisokat,  $\text{W}_5\text{O}_{14}$ -t és  $(\text{NH}_4)_2\text{W}_2\text{O}_7 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ -t kaptunk. Ezeknek a különlegessége, hogy idáig csak rendkívül magas hőmérsékleten, vákuumban sikerült előállítani őket. A tömény  $\text{NH}_3$  oldatok mellett tartva ezek a fázisok 4 hét után átalakultak APT-vé. Kevésbé tömény, 1 M-os  $\text{NH}_3$  oldat esetén a nagyobb szemcseméretű  $\text{WO}_3$ -ból  $(\text{NH}_4)_{10}[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{42}] \cdot 10\text{H}_2\text{O}$  (APT $\cdot$ 10 $\text{H}_2\text{O}$ ), a kisebb szemcseméretű  $\text{WO}_3$ -ból APT keletkezett. Kisebb  $\text{NH}_3$  parciális nyomásoknál alig vagy egyáltalán nem volt változás: 0,5 M-os  $\text{NH}_3$  oldat esetén a  $\text{WO}_3$  csak részlegesen alakult át APT-vé, míg a 0,1 M-os  $\text{NH}_3$  oldatnál nem történt reakció.

Összefoglalva sikerült elérni a kitűzött célt, és alternatív utat dolgoztunk ki az APT előállítására. Az új szilárd-gázfázisú heterogén szintézis egyszerű, nem érzékeny a körülményekre ( $\text{WO}_3$  összetétel, szemcseméret, kristályszerkezet,  $\text{NH}_3$  oldat koncentráció 1-16 M között), ellentétben a bonyolultabb és érzékenyebb nedves kémiai módszerrel.

## Piridino-18-korona-6-éter alapú új királis állófázisú kromatográfiás rendszer optimalizálása

Földi Tamás MSc. I. évfolyam

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**Dr. Balogh György Tibor** c. egyetemi docens

Richter Gedeon Nyrt. Vegyészeti Gyár

Konzulensek: **Lévai Sándor** kutató-fejlesztő

Richter Gedeon Nyrt. Vegyészeti Gyár

**Dr. Kupai József** posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az általam vizsgált kromatográfiás oszlop töltete a korábban vizsgált piridino-18-korona-6-éter alapú oszlophoz képest [(*S,S*)-CSP-1] a szilikagélt és a koronaétert összekötő lánc minőségében különbözik. Míg az [(*S,S*)-CSP-1] esetén a piridin gyűrű 4-es pozíciója egy karbamid-származék nitrogénatomján keresztül kapcsolódik az állófázishoz, addig az új [(*S,S*)-CSP-2] esetén a piridin gyűrű szintén 4-es helyzetében egy *para*-benzoesavamid származék aromás szénatomján keresztül kapcsolódik a szférikus HPLC szilikagél felületéhez. A kísérleti munka során azt tapasztaltam, hogy az új állófázis kromatográfiás tulajdonságai nagymértékben eltérnek a korábban vizsgált oszlop tulajdonságaitól.

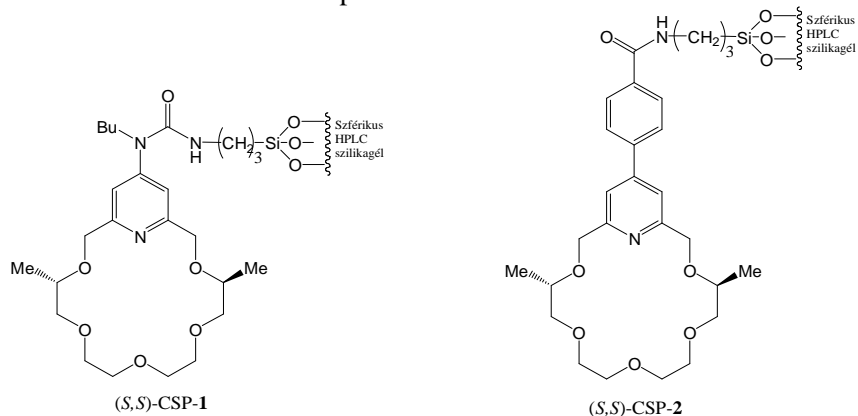
Munkám célja volt az új [(*S,S*)-CSP-2] optimális működési paramétereinek meghatározása primer aminok és aminosavészterek elválasztása során.

A módszerfejlesztés során kiindulási pontként a korábban vizsgált állófázis esetén kapott paramétereiket használtam. Így méréseimet polár-organikus módban végeztem. Az alkalmazott mozgófázisok különböző arányban acetonitrilt, metanolt, valamint hangyasavat és trietil-amint tartalmaztak.

Méréseim során hét különböző királis primer amin és nyolc aminosav-észter retenciósi tulajdonságait vizsgáltam az új állófázison.

A kapott eredmények alapján megállapítható, hogy az aszparaginsav-dibenzilészter kivételével mindegyik analit esetén tapasztaltunk enantioszelektivitást. Az primer aminok enantiomereinek többsége igen nagy retenciósi idő különbséggel eluálódottak.

A rendelkezésemre álló tiszta enantiomerekkel végzett vizsgálatok alapján az 1-feniletánamin (1-PEA), az 1-(4-brómfenil)etánamin (bróm-PEA), az 1-(4-nitrofenil)etánamin (nitro-PEA), az 1-(naftalin-1-il)etánamin (1-NEA) és az 1-(naftalin-2-il)etánamin (2-NEA) esetében mindig az *R* enantiomer eluálódott később, tehát ezekben az esetekben a heterokirális komplex stabilitása nagyobb volt a homokirális komplex stabilitásánál. A (1*R*,2*R*)-1,2-bisz(2-hidroxifenil)etiléndiamin (bisz-amin) esetén viszont fordított elúciós sorrendet kaptam.



## Transzmissziós Raman spektrometria alkalmazása a gyógyszeriparban

Farkas István MSc. II. évfolyam

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

Konzulens: **Vajna Balázs** doktorjelölt  
Oracle

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

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

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

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



## Antibakteriális hatású titán-dioxid bevonatok

Szabó Réka BSc. IV. évfolyam

Témavezető: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi docens

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulensek: **Dr. Suhajda Ágnes** tudományos munkatárs

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

**Volentiru Emőke** PhD. hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Napjainkban egyre fontosabbá válik a környezettel szemben kíméletes, ugyanakkor hatékony sterilizáló eljárások kialakítása. Az új technológiáktól elvárjuk, hogy könnyen használható formában nyújtsanak olcsó fertőtlenítési megoldásokat. Az egészségügyben és az élelmiszeriparban különösen fontos az eszközök felületén megtelepedő kórokozók praktikus és tartós módon való eltávolítása. A mikroorganizmusokkal történő munkát nehezíti, hogy gyakori az ellenálló képesség kialakulása bizonyos szerekre, gondoljunk például az antibiotikum rezisztenciára.

Céлом olyan bevonatok előállítása volt, melyek közönséges körülmények között, látható fényvel megvilágítva antibakteriális hatással rendelkeznek. Az egyik legígéretesebb, nem hagyományos technika ezen a területen a fotokatalitikus anyagok alkalmazása, melyek viszonylag olcsók és nem környezetszennyezők. Munkám során ezüsttel és egyéb porozításnövelő szerekkel adagolt  $\text{TiO}_2$  vékonyrétegekkel foglalkoztam. A bevonatokat dip-coating szol-gél technikával állítottam elő. A  $\text{TiO}_2$  az egyik leghatékonyabb fotokatalitikus anyag, amely magas aktivitással, erős oxidáló hatással és hosszú távú kémiai stabilitással rendelkezik. Mivel a  $\text{TiO}_2$  csak UV tartományú fényvel gerjeszthető, ezért a praktikusabb alkalmazhatóság érdekében a fotoaktivitás látható tartományra való kiterjesztése a  $\text{TiO}_2$  adalékolását teszi szükségessé. Az eddigi kutatások alapján a nemesfém nanorészecskékkel való adagolás az egyik leghatékonyabb módszer ezen a területen. Az elemi ezüst növeli a fotokatalitikus aktivitást, segítségével a  $\text{TiO}_2$  fotoaktivitása kiterjed a látható hullámhossz tartományra is, ráadásul az ezüst nanorészecskék önmagukban is rendkívül hatékony antibakteriális aktivitással rendelkeznek.

Feladataim közé tartozik a különböző adalékanyagokkal templátolt (CTAB és Pluronic<sup>®</sup> triblokk kopolimer)  $\text{TiO}_2$  bevonatok antibakteriális és optikai tulajdonságainak összehasonlítása, a kísérleti tapasztalatok értelmezése és a legkedvezőbb kiválasztása. Az üvegfelületre felvitt bevonatok törésmutatóját, vastagságát és porozitását UV-Vis spektrofotometriás eredményekből becsültem meg. A vékonyrétegek antibakteriális hatását különböző tenyésztési módszerekkel vizsgáltam *Escherichia coli* baktériumok felhasználásával. Az ezüst nanorészecskék méretének meghatározására TEM-felvételek, a vékonyrétegek felületi morfológiájának tanulmányozására pedig SEM-képek készültek.

Célkitűzésemnek megfelelően sikerült látható fényben is aktív antibakteriális hatású bevonatokat kialakítanom, melyek további fejlesztést követően jó szolgálatot tehetnek például a közegészségügyben vagy szinte bármilyen bevonásra alkalmas használati cikken. Munkám során kimutattam, hogy a mezopórusokban kialakított – feltehetően – rendkívül kisméretű Ag-szemcséket tartalmazó bevonatok antibakteriális hatása eléri a nagyságrendekkel nagyobb mennyiségű ezüstöt tartalmazó bevonatok aktivitását.

## SiH<sub>3</sub>Cl hidrolízisének vizsgálata

Szabó Gergő BSc. II. évfolyam

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

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A klórszilánok számos alkalmazásban használatosak, többnyire mint kiindulási anyagok. A klór könnyen lecserélhető valami más atomra, atomcsoportra, ez felhasználásuk alapja. A nagy reakcióképesség egyben a hátrányuk is, hiszen nagyon könnyen hidrolizálnak. Ez nehezíti tárolásukat, csökkenti a felhasználhatóságukat is, a reakciók során a víz kizárásáról gondoskodni kell, ugyanis a szilícium-klór kötést tartalmazó vegyületek még a levegő nedvességtartalmával is reagálnak. Ez a tulajdonság nem egyedülálló, a foszfor és a kén iparilag is alapvető fontosságú kloridjainál (PCl<sub>3</sub> és SOCl<sub>2</sub>) is ugyanez a probléma merül fel. Mindezek ellenére meglepően kevés részlet ismert a halogénszilánok hidrolízisének mechanizmusáról, s a különböző munkák egymásnak ellentmondanak.

Mivel van példa arra, hogy a részletes mechanizmus ismeretében a körülményeket alkalmasan megváltoztatva a résztvevő vízmolekulák számától függően visszaszorítható a hidrolízisreakció, a TDK dolgozat célja a SiH<sub>3</sub>Cl - a legegyszerűbb szilícium – klór kötést tartalmazó rendszer - hidrolízisének tanulmányozása számításon kémiai módszerekkel, különböző mennyiségű reagáló vízmolekula jelenlétében.

A reakcióban résztvevő vízmolekulák számát egy és öt között változtatva megkerestem a reakciók átmeneti állapotát, és végtermékeit, mely hidrogénhíddal stabilizált sósav, valamint szilanol. A munka során a korábbi kutatásokhoz képest új átmeneti állapotokat, reakcióutakat találtam. Általánosságban az állapítható meg, hogy a vizek számának növelése csökkenti az aktiválási energiát, így növeli a reakciósebességet. Az egy reaktáns vízmolekula esetén számottevően nagyobb az aktiválási energia, mint akár 2 reagáló víznél. Az aktiválási energia a diszperziós kölcsönhatást figyelembe vevő funkcionálokkal (különösen az M06-2X esetén) jelentős csökkenést mutat több reagáló vízmolekula esetén. A kialakuló köztitermék hipervalens szilíciumot tartalmaz. A fentiek alapján a vízklaszterek méretét megváltoztató oldószerek felhasználásával lehetőség kínálkozik klórszilánok hidrolízisének célzott befolyásolására.

## **Reaktív elektromos szálhúzással előállított mesterséges extracelluláris mátrixok orvos-biológiai alkalmazásra**

**Molnár Kristóf** MSc. II. évfolyam

Témavezető: **Dr. Zrínyi Miklós** egyetemi tanár

SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

Konzulens: **Dr. Jedlovszky-Hajdú Angéla** tudományos munkatárs

SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

A modern orvosbiológia gyorsan fejlődő területe a szövetmérnökség. Ennek egyik célja az emberi szervezetben megtalálható extracelluláris mátrix mesterséges előállítása. Feladata olyan biokompatibilis fibrilláris szöveti struktúra létrehozása, amely sejtszinten képes a regenerációt irányítani. Az elektromos szálhúzás alkalmas módszert jelent nano- és mikrométer átmérőjű polimer szálakból képzett hálózatok előállítására.

Munkám során kidolgoztam poliaminosav alapú polimerekből álló mesterséges szöveti struktúrák előállítását, valamint vizsgáltam humán eredetű őssejtek és mesterséges hálók orvosi alkalmazhatóságának lehetőségét. A mesterséges extracelluláris mátrixokat reaktív elektromos szálhúzással állítottam elő poli(aszparaginsav) anhidridjéből a poli(szukcinimid)-ből. A szálképzés eredményeként térhálósított, és így már fel nem oldódó poli(szukcinimid) szálhalmaz jön létre, melyből lúgos hidrolízissel poli(aszparaginsav) alapú térháló állítható elő. Ennek struktúráját fény-, pásztázó elektron- és atomerő-mikroszkóp segítségével vizsgáltam. Meghatároztam az átmérő méret szerinti eloszlását és az átlagos szál vastagságot.

Az általam előállított mesterséges extracelluláris mátrixon együttműködésben a Semmelweis egyetem Orálbiológiai Tanszékével őssejt növesztési kísérleteket, valamint a Semmelweis Egyetem Kísérletes és Sebészeti Intézetével, kísérleti nyulakon állatkísérleteket végeztünk.

## Szabályozott hatóanyag-leadására alkalmas pórusos szilika alapú modellrendszer fejlesztése

Dabóczi Máttyás BSc. III. évfolyam

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

Konzulens: **Dr. Kabai-Faix Márta** tudományos tanácsadó  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

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

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

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

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

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

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

Köszönettel tartozom az Országos Tudományos Kutatási Alapnak (OTKA CK 78629), a Nemzeti Fejlesztési Ügynökségnek (Társadalmi Megújulás Operatív Program, TÁMOP - 4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002) valamint a Nemzeti Kutatási és Technológiai Hivatalnak (NKTH-A\*STAR Kétoldalú Tét Pályázat, BIOSPONA) az anyagi támogatásért.

## Cellulóz alapú hidrogélek előállítása és jellemzése

Fekete Tamás MSc. II. évfolyam

Témavezető: **Dr. Borsa Judit** egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Dr. Takács Erzsébet** osztályvezető

MTA Energiatudományi Kutatóközpont, Izotópkutató Intézet

A hidrogélek nagy mennyiségű folyadék megkötésére alkalmas térhálós polimerek. Széles területen alkalmazhatók, mint például az egészségügyben, a mezőgazdaságban és az analitikában. Bár a szintetikus polimerekből készült hidrogélek terjedtek el, napjainkban egyre jelentősebbek a törekvések a megújuló alapanyagokkal való helyettesítésére. Kutatásom célja a legnagyobb mennyiségben megújuló nyersanyag, a cellulóz származékainak felhasználásával a gyakorlati követelményeknek megfelelő hidrogélek előállítása.

Munkám során három cellulóz-származék (karboxi-metil-cellulóz (CMC), hidroxietil-cellulóz (HEC), hidroxipropil-cellulóz (HPC)) felhasználásával állítottam elő tiszta és keverék hidrogéleket, keresztkötő ágensként citromsavat, N,N'-metilén-biszakrilamidot, N-vinil-pirrolidont és akrilsavat alkalmazva. A térhálót három fő módszerrel hoztam létre: hőkezeléssel, citromsavas keresztkötéssel és  $\gamma$ -sugárzás hatására lejátszódó térhálósodással.

Az előállított géleket a duzzadási fokkal és a szol-gél aránnyal jellemeztem, a morfológiát SEM felvételek alapján értékeltem ki. Meghatároztam a tulajdonságok előállítási paramétereiktől való függését: a hőkezelés esetén a hőkezelési idő és a hőmérséklet, a citromsavas térhálósítás esetén az ágens- és oldatkoncentráció, míg sugárzásos keresztkötés esetén a dózis, a keresztkötő ágensek jelenlétének és koncentrációjának hatását. További lényeges tényező volt keverékek esetén az összetétel, illetve a duzzadási vizsgálatok során a pH és az ionerősség hatása és a vízfelvétel időfüggése.

Mindhárom eljárás alkalmasnak bizonyult gélek előállítására. A hőkezelés során a kezelési idő és a hőmérséklet növelése jobb térhálót eredményezett. Túl magas hőmérséklet és magas hőmérsékleten túl hosszú hőkezelés esetén a minták degradálódtak. A citromsav már kis koncentrációban erős térhálót hozott létre, a koncentráció növelése a duzzadást csökkentette. HEC gélek előállítására nem bizonyult alkalmasnak, azonban a CMC-HEC keverékek tulajdonságai jobbak voltak a CMC gélekénél. A sugárzásos eljárásnál a dózissal nőtt a térhálósűrűség és a gélarány, de nagy dózisok esetén (>100 kGy) a láncok degradációja került előtérbe. Keresztkötő ágensek adagolásával és koncentrációjuk növelésével az adott tulajdonságú gélek előállításához szükséges dózis jelentősen csökkenthető volt.

A minták vízfelvétele az első órákban volt jelentős, majd ezt követően lelassult. Az egyensúly 10-24 óra alatt állt be, a minták típusától függően. Az ionerősség és a pH hatása eltért az egyes származékok esetében. A keresztkötők alkalmazása és az előállítás módja jelentősen befolyásolta a minták morfológiáját.

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

**Solti Katalin MSc. II. évfolyam**

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

Konzulens: **Némethy Árpád** tanszéki mérnök  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

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

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

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

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

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

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

### **Referenciák:**

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

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

**Kalmár Szabolcs** BSc. IV. évfolyam

Témavezetők: **Dr. Renner Károly** tudományos munkatárs

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

**Dr. Móczó János** tudományos főmunkatárs

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

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

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

## A kinaldin és 6-cianokinaldin fluoreszcens jelzőmolekulák spektroszkópai jellemzése

Halmi Bence BSc. IV. évfolyam

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

Konzulensek: **Dr. Vidóczy Tamás** egyetemi magántanár  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék  
**Dr. Kubinyi Miklós** egyetemi tanár  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A nitrogéntartalmú aromás rendszerek ciano-szubsztituáltjainak fluoreszcencia intenzitása (és élettartama) csökken protikus-poláris közegben.[1,2] A jelenség révén az ilyen vegyületek potenciális fluoreszcens jelzőanyagok („dye probes”), amelyek alkalmasak lehetnek biológiai rendszerekben (fehérjék, membránok) a lokális víztartalom mérésére, változásának követésére. Tanszékünkön korábbi kutatások folyamán az indolin ciano- és metil-szubsztituált származékait vizsgálták.[3] A ciano-szubsztituált vegyületeknél nagy mértékű fluoreszcencia-élettartam csökkenés volt tapasztalható vizes illetve etanolos oldatban, a szerves oldószerekben (pl.:hexán, acetonitril) megfigyeltekhez képest, ami a CN-HO hidrogénkötés létrejöttével függ össze, emiatt nő meg a belső konverzió súlya a sugárzásos átmenettel szemben.

A jelen kutatás során a kinaldin és 6-cianokinaldin abszorpciós színeképét, fluoreszcencia színeképét, -élettartamát és kvantumhatásfokát mértük különböző oldószerekben, és oldószerkegyekben, azzal a céllal, hogy a változásokat értelmezve következtessünk arra, hogy ezek az anyagok használhatók-e a protikus közegre érzékeny fluoreszcens jelzőanyagként.

Oldószerként diklórmétánt, hexánt és etanolt használtunk, továbbá kísérleteket végeztünk acetonitril vízzel, etanollal illetve propilén-karbonáttal képzett elegyeiben.

Abszorpciós illetve fluoreszcens gerjesztési és emissziós spektrumok vizsgálatából kiderült, hogy mindkét vegyületnek kizárólag a protonált formája mutat mérhető fluoreszcenciát; ennek kapcsán mindkét vegyület pKa értékét meghatároztuk különböző pH-jú vizes oldatokban felvett UV-látható abszorpciós spektrumok alapján. Az oldószerkegyekben végzett mérések azt mutatták, hogy a mindkét vegyület fluoreszcencia kvantumhatásfoka és élettartama erősen csökken a protikus oldószer arányát növelve. A nagyobb érzékenység – a feltehetően erősebb hidrogénhidakat képző – 6-cianokinaldin esetében volt észlelhető. Így acetonitrilben az utóbbi vegyület fluoreszcencia élettartama 9,75 ns-ről 3,30 ns-ra, kvantumhatásfoka 0,29-ről 0,085-re csökken, ha az oldószer víztartalmát 0,1%-ról (v/v) 0,7 %-ra növeljük.

[1] J. Oshima, T. Yoshihara, S. Tobita; Chem. Phys. Lett. 2006, 423, 306–311.

[2] L. R. Naik, H. M. Suresh Kumar, S. R. Inamdar, N. N. Math; Spectrosc. Lett. 2007, 38:4-5, 645-659.

[3] K. Pál, M. Kállay, G. Köhler, H. Zhang, I. Bitter, M. Kubinyi, T. Vidóczy, G. Grabner; ChemPhysChem 2007, 8, 2627 – 2635.



## **Poli(szukcinimid) és poli(aszparaginsav) gélek mechanikai, duzzadási és degradációs tulajdonságainak vizsgálata**

**Juriga Dávid MSc. II. évfolyam**

Témavezető: **Dr. Zrínyi Miklós** egyetemi tanár

SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

Konzulens: **Dr. Jedlovsky-Hajdú Angéla** tudományos munkatárs

SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport

Polimergélek orvos-biológiai és gyógyszerészeti célú kutatása fontos területté vált az elmúlt évtizedekben. Ha figyelembe vesszük, hogy az élő szervezet nagy folyadéktartalmú, jelentős részben gél állapotú lágy anyag, akkor természetes igényként merül fel a szövetekkel és a testnedvekkel kompatibilis, ezekhez hasonló kémiai, mechanikai, reológiai és transzport tulajdonságú biokompatibilis gélek kifejlesztése. Szintetikus poli(aminosav) gélekkel kapcsolatos kutatások, csak az utóbbi évtizedben kezdődtek meg. Természetes aminosavakból olyan mesterséges poli(aminosav) gélek állíthatók elő, amelyek eredményesen alkalmazhatók az orvos-biológia és a gyógyszerészet több területén.

Kutatómunkám fő célja olyan poli(aszparaginsav) alapú gélek előállítása, és tulajdonságainak vizsgálata, melyek duzzadásfoka a térhálót összetartó kétféle térhálósító molekula egyikének felbontásával nagymértékben változtatható. Ez lehetőséget teremt szabályozható hatóanyag leadás szempontjából fontos nyitó-záró mechanizmus kifejlesztésére. Kísérleteimhez poli(szukcinimid)-et illetve ennek hidrolizált változatát, a poli(aszparaginsav)-at használtam. A polimer láncokat diaminobutánnal és cisztaminnal térhálósítottam, majd hidrolizáltam. A poli(aszparaginsav) hidrogél keresztkötésében lévő diszulfid hidat ditiotreitol és merkaptotanol redukálószerekkel, valamint a szervezetben is megtalálható tripszin, kollagenáz és diszpáz enzimekkel bontottam. A térhálósítás mértékének csökkenését a gélek egyensúlyi méretének és rugalmassági modulusának mérésével követtem.

Megállapítottam, hogy a redukáló szerek és enzimek hatására a gélekre jellemző fontos tulajdonságok (duzzadásfok, rugalmassági modulus stb.) nagymértékben változnak. Megállapítottam, hogy fogpulpa és foggyökérhártya őssejtek által termelt enzimek megindítják a poli(aszparaginsav) gélek biodegradációját.

## **Atmoszférikus hidegplazma kezelés alkalmazása cellulóz alapú szálanyagok felületi tulajdonságainak módosítására**

**Sztankovics Andrea** MSc. I. évfolyam

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

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

**Szabó Orsolya Erzsébet** PhD. hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Dr. Tóth András** tudományos főmunkatárs

MTA Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Az utóbbi időben a textilkészítésben a jól kontrollálható plazma-alapú módszerek a legtöbbet vizsgált felületmódosítási eljárások, amelyekkel a textilanyagok funkcionalitásának és használati értékének a növelése környezetbarát módon valósítható meg. A plazma ionizált gáz, amely szabad elektronokat, ionokat, atomokat, gyököket, gerjesztett részecskéket és fotonokat tartalmaz. Textilek felületmódosítására a hidegplazma alkalmas, amelyben az atomok szobahőmérsékleten, vagy ahhoz közeli állapotban vannak, elektronhőmérsékletük azonban ennél akár nagyságrendekkel is nagyobb lehet. Ennek köszönhetően a hidegplazma kezelés fizikai és kémiai változásokat okoz a szálak és szövetek felületi rétegeiben és speciális funkciók kialakítását teszi lehetővé.

Tudományos diákköri dolgozatomban nyers pamut- és lenszövetek plazmakezelésével foglalkoztam és a plazmakezelés paramétereinek a függvényében vizsgáltam a kiindulási hidrofób szálfelület tulajdonságainak a módosulását. A szálfelület hidrofilitásának jellemzésére a cseppentéses módszert alkalmaztam és mértem a peremszöget. A folyadékszívás mérés eredményeiből a felületi energiát számoltam ki. A felület összetételében lejátszódó változásokat infravörös spektroszkópiával (FT-IR ATR) és röntgen fotoelektron spektroszkópiával (XPS) követtem. A felület morfológiai változásait atomierő mikroszkóppal (AFM) és scanning elektron mikroszkóppal (SEM) jelenítettem meg. A szálfelület viasszal borított külső rétegének a megbontását enzimes modellreakcióval is igazoltam.

## Ciklodextrin alapú mikroszálak gyógyszeripari alkalmazása

Horváthová Tímea MSc. II. évfolyam

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi tanársegéd

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Vigh Tamás** PhD. hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Napjainkban az újonnan szintetizált és biológiailag aktívnak talált vegyületek jelentős hányada rossz vízoldhatóságú. Ezért a gyógyszerformulálásnak egyik igen fontos feladata a hatóanyagok oldhatóságának és kioldódásának javítása különböző módszerekkel, mely végeredményben a biológiai hasznosulás növekedését eredményezi. Ennek elérésére új, a korábbiaknál hatékonyabb technológiák fejlesztésére van szükség és ezért a gyógyszeripari kutatás-fejlesztés egyre inkább fordul ígéretes nanotechnológiák felé is. Erre a célra potenciálisan jól alkalmazható nanotechnológiai eljárás az elektrosztatikus szálhúzás.

Munkám célja a vízben rosszul oldódó hatóanyagok kioldódásának hathatós javítása volt, a gyógyszeriparban még nem alkalmazott elektrosztatikus szálhúzással. Kísérleteim során egy szteroid típusú diuretikumot, a spironolaktont illetve egy nem szteroid típusú gyulladáscsökkentőt, a diklofenak nátriumot használtam, mint vízben rosszul oldódó hatóanyag. Ezen hatóanyagokból új típusú, ciklodextrin alapú szálszövedékeket állítottam elő, azzal a különbséggel, hogy a spironolaktont tartalmazó rendszer mellett polivinil-pirrolidont is alkalmaztam a szálképzéshez. A hatóanyagok kioldódásának kinetikáját ultraibolya-látható (UV-Vis) spektrofotométerrel követtem. Az előállított szálak morfológiáját optikai mikroszkóppal és pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) vizsgáltam. A Raman-mikrospektrometriás, valamint a por-röntgendiffrakciós (XRPD) vizsgálatok igazolták, hogy a hatóanyag amorf formában van jelen a hordozóban mindkét hatóanyag esetén.

Rosszul oldódó hatóanyagok vízben jól oldódó nanoszálakba ágyazásával jelentősen sikerült javítani azok kioldódását, amit a kialakított hatalmas fajlagos felülettel és a pillanatszerű száradás következtében létrejövő amorfizálódással magyaráztunk. E technológia hatékony megoldást nyújthat a rosszul oldódó hatóanyagok kioldódásának javítására emellett alkalmas lehet szájban diszpergálódó/oldódó készítmények, illetve rekonstrukciós injekciók előállítására rossz vízoldhatóságú hatóanyagok esetében is.

## Poliaszparaginsav rezszonzív tulajdonságainak módosítása

Németh Csaba MSc. II. évfolyam

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

Konzulens: **Gyarmati Benjámín** egyetemi tanársegéd  
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Napjaink gyógyszerkutatásában egyre nagyobb hangsúlyt fektetnek a hatóanyagok minél pontosabb hely és idő szerinti célba juttatását elősegítő, ún. „szabályozott és célzott hatóanyag-leadású” rendszerek fejlesztésére. A modern hatóanyag-leadó rendszerek fő előnye a mellékhatások csökkentésében és az effektív hatóanyagszint hosszú idejű fenntartásában rejlik.

Ezen törekvések egyik legfontosabb képviselője az Eudragit cég által kifejlesztett pH érzékeny gyógyszer-filmbevonat termékcsalád, mely akrilát alapú kopolimerekre épül. A kopolimerek fizikai-kémiai sajátosságai az összetétellel széles határok között változtathatók. Az Eudragit polimer-filmek egyik hátrányos tulajdonsága, hogy biológiailag nem lebonthatók.

A problémára megoldást jelenthet a pH érzékeny poliaszparaginsav (PASP) alkalmazása. A PASP orvosi biológiai szempontból az egyik legígéretesebb polimer, hiszen a poliaminosav bizonyítottan biokompatibilis és biológiailag lebontható, valamint polielektrolit jellegének köszönhetően oldhatósága erősen függ az oldat pH-jától és az ionerősségétől.

Kutatómunkám célja olyan módosított PASP polimerek előállítása volt, melyek rezszonzív tulajdonságai – pH- és hőmérsékletfüggés – különböznek az alap polimer adott jellemzőitől, és a későbbiekben estelegesen gyógyszer-filmbevonatok alapjául szolgálhatnak, alternatívát kínálva az akrilát alapú polimerekre.

Munkám során különböző monoaminokkal és diaminokkal módosítottam a poliszukcinimid (PSI) polimert, a termékeket hidrolízissel poliaszparaginsav származékokká alakítottam. Sikerült előállítanom a PASP polimerhez képest eltérő pH és hőmérséklet-érzékenységgel rendelkező polimereket. Optimalizáltam a módosított PASP polimerek oldatból való kinyerését és tisztítását. Oldhatósági kísérletekkel vizsgáltam a módosított polimerek fizikai-kémiai tulajdonságait, és az adott módosító molekuláknak a polimer rezszonzív tulajdonságaira gyakorolt hatását.

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

### Referenciák:

- [1] T. Gyenes, V. Torma, B. Gyarmati, M. Zrínyi: *Advanced Drug Delivery Reviews*, 4,733–744 **2008**  
[2] D. Schmaljohann: *Acta Biomaterialia*, 58,1655–1670 **2006**

## Gabona alapú őrlemények reológiai és végtermék tulajdonságainak összehasonlító vizsgálata

Molnár Dóra BSc. IV. évfolyam

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Bucsella Blanka** PhD. hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A búzaliszt táplálkozási értékét oly módon növelhetjük, hogy a búzaszemben jelenlévő, de a hagyományos őrlési technikákkal ki nem aknázott potenciát kihasználjuk. A búzaszemben jelentős mennyiségű egészségtámogató funkcionális komponens, például élelmi rost van jelen, melyek többségét a jelenlegi nagyipari malmi technológiákkal eltávolítják.

A Gyermely ZRT.-vel közös fejlesztés eredményeként létrejött új őrlési technológiával a hagyományos fehér lisztekhez képest lényegesen kedvezőbb összetételű búzaőrlemény állítható elő. Munkám céljából tűztem ki az új típusú őrlemény összehasonlító vizsgálatát a jellegében hasonló rozs, zab illetve a teljes kiőrlésű búzaliszttel. Ezen őrlemények felhasználása sütőipari célokra elsősorban nem önmagukban történik, hanem hagyományos búzalisztekkel keverve, ezért az említett liszteknek hagyományos búzaliszttel alkotott keverékeit is vizsgáltam. Arra kerestem választ, hogy a keverésnek milyen hatása van a kialakuló térszerkezetre és a végtermékre.

A kísérleti munkám során vizsgáltam az őrlemények összetételét. A lisztekhez és keverékekhez előállítható térszerkezet reológiai jellemzésére a fehérjé- és a szénhidráttól függő dagasztási és viszkozitási tulajdonságokat is vizsgáltam. Meghatároztam továbbá az őrlemények esésszám és Zeleny értékeit is. A technológiai minőség jellemzésére szabványos sütőipari végtermékeszteket végeztem, próbapókat készítettem és minősítettem.

Az eredményeim azt mutatják, hogy az új funkcionális kísérleti liszt kémiai összetételében teljesen eltér a hagyományos búzaliszttől. Fehérje tartalma magasabb a zab- és rozslisztnél, rosttartalma megközelíti a teljes kiőrlésű búzalisztét. A kísérleti lisztből előállított térszerkezet kialakulása és stabilitása a zab és teljes kiőrlésű búzaliszthez hasonló. Az őrleménykeverékek esetében a reológiai paraméter nem lineáris változását figyeltük meg, ami figyelembe veendő a termék előállítás folyamataiban, illetve az elméleti kutatások során a perdikációs modellek megalkotásánál. Eredményeink alapján a kísérleti liszt előnyös táplálkozási és a megfelelő ismeretek birtokában irányítható technológiai tulajdonságai alapján értékes új tagja lehet a búzaőrleményeknek.

Munkám elvégzését a „Egészségmegőrzés és hagyomány: alapanyag-, termék- és technológiafejlesztés a gabonavertikumban” c. (TECH\_08\_A/2-2008-0425), és a Pannon búza fajták és fajtajelöltek nemesítése, termesztési és élelmiszeripari feldolgozási rendszerének fejlesztése (Tech\_09-A3-2009-0221) c. NTP kutatási projektek támogatása tette lehetővé. Emellett a téma kapcsolódik "Minőségorientált, összehangolt oktatási és K+F+I stratégia, valamint működési modell kidolgozása a Műegyetemen" c. projekt (TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002) szakmai célkitűzéseinek megvalósításához.

## SMAD 2 és 3 szerepe a gyulladásoos bélbetegség patomechanizmusában

Veres-Székely Apor BSc. III. évfolyam

Témavezető: **Dr. Vannay Ádám** laboratóriumvezető

SE - MTA Gyermekgyógyászati és Nefrológiai Kutatócsoport

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Bevezetés: A gyulladásoos bélbetegség (IBD) patomechanizmusában központi szerepet játszik a tumor necrosis factor alfa (TNF- $\alpha$ ), ennek jelentőségét emeli ki az IBD-s betegek kezelésére bevezetett anti-TNF- $\alpha$  terápia egyre nagyobb térhódítása is. Az alkalmazott konzervatív kezelések, biológiai terápiák ellenére az IBD-ben szenvedő betegekben gyakran alakul ki fibrózis.

Célkitűzés: A TNF- $\alpha$  és a szöveti fibrózis patomechanizmusában központi szereppel bíró SMAD2/3 kapcsolatának vizsgálata IBD-s gyerekek kolon nyálkahártyájában, valamint HT-29 sejtvonalon.

Beteganyag, módszer: A SMAD 2/3-foszforilációt Western blot módszerrel vizsgáltuk IBD-s gyerekek gyulladt illetve nem gyulladt (n=15), illetve egészséges gyerekek (n=10) kolonból származó biopsziás mintáin. A SMAD 2/3, ERK 1/2, JNK 1/2 jelátvivő molekulák lokalizációjának meghatározása immunfluoreszcens festéssel történt. Továbbá HT-29 sejtvonalon, áramlási citométerrel vizsgáltuk a TNF- $\alpha$  citokin-kezelés SMAD 2/3 foszforilációjára kifejtett hatását.

Eredmények: Immunfluoreszcens festés során a gyulladt nyálkahártya entreocita sejteiben erőteljes SMAD 2/3 foszforiláció mutatkozott. Western blot analízis során a SMAD 3 foszforilációja szignifikáns emelkedést mutatott a gyulladt nyálkahártyában, összehasonlítva a nem gyulladt szakasszal és az egészséges kontroll csoporttal. Áramlási citometriás mérések során a TNF- $\alpha$ -kezelt HT-29 sejtekben a foszforiláció szignifikánsan emelkedett a kezeletlen sejtcsoporthoz képest.

Következtetés: Az IBD-ben szenvedő gyerekek bélnyálkahártyájában a TNF- $\alpha$  szerepet játszhat a SMAD 3 aktiváció szabályozásában. A SMAD 2/3 jelátvivő rendszer, egyéb szervekhez hasonlóan az intesztinális fibrózis patogenezisében is szerepet játszhat.

## A hasadó élesztő G1-fázisú méretkontrolljának vizsgálata matematikai modellezéssel

Lovász Krisztina BSc. IV. évfolyam

Témavezető: Dr. Sveiczter Ákos egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A méretkontroll a sejtciklusban ható ellenőrzési folyamat, melynek köszönhetően a sejtek átlagos mérete az egyes osztódások után, valamint az egész populációra nézve állandó marad. Az Ascomycota tagozatba sorolható *Schizosaccharomyces pombe* vagy más néven hasadó élesztő régóta fontos modellorganizmusként használatos egyedi osztódási tulajdonságai miatt. Szimmetrikus osztódásának köszönhetően nagyon jó szinkronizálási eljárásokra ad lehetőséget. A vad típusú hasadó élesztő sejtciklusát rövid G1- és hosszú G2-fázis jellemzi. A méretkontroll gyakorlatilag csak a mitózis előtt működik, a DNS-szintézis előtt nem. Azt is mondhatjuk, hogy a G1-fázisú méretkontroll rejtett a vad típusú sejtben, míg *wee1* mutáns sejt esetében ez a releváns ellenőrző pont. A mechanizmusban meghatározó szereppel a ciklin-függő kinázok, röviden CDK fehérjék rendelkeznek, melyek különböző fehérjék foszforilezése útján a sejtciklus következő fázisába juttatják a sejtet. Közülük a két legfontosabb az SPF, ami az S-fázisba és az MPF, ami az M-fázisba való átlépést segíti elő.

Az ellenőrzési mechanizmus legfontosabbnak vélt és ismert molekuláris kölcsönhatásainak minden tagjára kinetikai egyenletet írunk fel, ami több részből áll: szintézis, lebomlás, aktiválás stb. Így egy sokparaméteres differenciálegyenlet rendszert kapunk, amit csak közelítő módszerekkel lehet megoldani. A méretkontroll működését leíró matematikai modellt a WinPP<sup>®</sup> nevezetű, differenciálegyenleteket numerikusan megoldó szoftverrel vizsgáltam.

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

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

## A P2X7 purin receptorok szerepe a génexpressziós változásokban a szkizofrénia fenciklidin indukált állatmodelljében

**Koványi Bence** MSc. II. évfolyam

Témavezető: **Dr. Sperlách Beáta** tudományos igazgató helyettes  
MTA-KOKI Molekuláris farmakológia Kutatócsoport

Konzulens: **Dr. Deák Veronika** egyetemi adjunktus  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A szkizofrénia bonyolult mentális betegség, amely a népesség körülbelül 1%-át érinti. Patomechanizmusában a szerotonin és dopamin diszreguláció mellett a glutaminerg hipofunkcionalitást is kimutatták szkizofrénias betegek agykérgi régiójában. Régóta ismert, hogy a neuronális, glia és immunsejteken egyaránt expresszálódó ATP érzékeny ioncsatorna, P2X7 receptorok kiemelt szerepet játszanak a mikroglia közvetítette neuronális sejthalálban, az IL-1 $\beta$  és más gyulladáshoz vezető mediátorok felszabadulásában és a nem-szelektív pórusképződés mediált apoptózisban. Ezen kívül a cerebrokortikális glutamaterg idegvégződéseken expresszálódó P2X7 receptorok aktivációja nagymértékben hozzájárul a fokozott glutamát és az azt követő GABA felszabaduláshoz és a glutamát mediált excitotoxicitáshoz. Célunk a génexpressziós változások tanulmányozása volt a szkizofrénia fenciklidin (PCP) indukált állatmodelljében, vizsgálatainkat a P2X7 receptor vad típusú (P2rx7 +/+), illetve nullmutáns (P2rx7 -/-) egértörzs bevonásával végeztük el. Az NMDA receptor antagonistá PCP-vel (2mg/kg) illetve fiziológiás sóoldattal intraperitoneálisan oltott egereket a kezelést követően 1 órával dekapituláltuk. A prefrontális kéreg mintákból a vizsgált gének mRNS expressziós szintjének meghatározását SYBR Green alapú kvantitatív real-time PCR technika segítségével végeztük el. 14 gén mRNS expressziós szintjének változását hasonlítottuk össze a P2rx7 +/+ és P2rx7 -/- egerek esetében, sóval illetve PCP-vel történő kezelést követően. A PCP kezelés hatására az irodalmi adatokkal korreláló szignifikáns változást mutattunk ki a neuregulin-1 és a metabotróp glutamát receptorok (mGluR2, mGluR5) expressziójában. A PCP kezelés mellett azonban a P2X7 receptor deficiencia önmagában is jelentős szignifikáns változást idézett elő az NMDA-típusú ionotróp glutamát receptorok (NR2A, NR2B), a metabotróp mGluR3 receptor és a GABA<sub>A</sub>  $\alpha$ 1 receptor alegység génjének mRNS expressziójában. Vizsgálataink alapján elmondható, hogy a P2X7 receptorok jelentős hatást gyakorolnak a szkizofréniaval összefüggésbe hozható gének expressziójára. A kutatás új irányvonala a fenti génexpresszióra gyakorolt hatások funkcionális következményeinek feltérképezése lehet, mely hozzásegíthet a szkizofrénia folyamatának jobb megértéséhez, emellett kiindulópontot jelenthet új típusú antipszichotikumok tervezéséhez.



## **Egy membránfehérje a sejtmagban**

**Vodicska Barbara MSc. I. évfolyam**

Témavezető: **Dr. Welker Ervin** laboratóriumvezető

MTA TK MFI Prion- és Fehérjekonformációs Betegségek Laboratórium

Konzulens: **Nyeste Antal** PhD hallgató

MTA TK MFI Prion- és Fehérjekonformációs Betegségek Laboratórium

A prion családba tartozó Prion (PrP) és Shadoo (Sho) fehérjék membránfehérjék, melyek szekréciós szignállal rendelkeznek N-terminálisukon, és így a szekréciós útvonalra kerülnek szintetizálódásuk során. C-terminálisukon glikozil-foszfatidil-inozitol(GPI)-horgony található, ennek segítségével kapcsolódnak a sejtmembránhoz. A fehérjék szubcelluláris lokalizációját fúziós konstrukciókban vizsgálva azt tapasztaltuk, hogy míg a Prion fehérje az emlős sejtek sejtmembránjában volt megtalálható, a Shadoo fehérje a normális membránlokalizáció mellett sejtmagi lokalizációt is mutatott a sejtek egy részében. TDK munkámban ezen kettősség okának feltárására koncentráltam.

Különböző fúziós fluoreszcens jelöléssel ellátott konstrukciókat emlős sejtenyészetben expresszáva vizsgáltam, hogy a Shadoo fehérje melyik része felelős a szokatlan viselkedésért. Mindkét fehérjében (PrP és Sho) található olyan szekvenciárészlet, amely a citoszolból a sejtmagba képes irányítani fehérjét, azonban az, hogy egy szekréciós fehérje hogyan kerülhet a citoszolba, nem világos.

Kísérleteim során azonosítottam a Prion és a Shadoo fehérjének azt a szegmensét, amely eltérő szubcelluláris lokalizációjukért felelős: azt találtam, hogy a Prion fehérje GPI-szignáljának jelenlétében a citoszolikus/magi lokalizáció minimálissá válik. Ezzel ellentétben ugyanazon a fehérjekonstrukción a Shadoo fehérje GPI-szignáljának jelenlétében jelentős magi lokalizáció figyelhető meg. Eredményeim arra utalnak, hogy fehérjék számára létezik átmenet a szekréciós útvonal és a citoszol között, amely szignáltranszdukcióban való részvétel, illetve kettős funkció ellátása esetén bírhat nagy jelentőséggel. Az átmenet mechanizmusának megértése további kutatómunkát igényel.

## Represszió - derepresszió elven működő molekuláris kapcsoló karakterizálása *Staphylococcus aureus*-ban

Kádár Veronika MSc. II. évfolyam

Témavezető: **Dr. Németh Veronika** tudományos munkatárs

MTA TTK Enzimológiai Intézet

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

BME Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszertudományi Tanszék

A *Staphylococcus aureus* patogenicitási szigetei (SaPI) a baktérium fertőzőképességéért felelős géneket (toxin) kódolnak, szerepük a virulens gének terjesztése a baktérium populációk közt. A SaPI kifejeződését egy Stl nevezetű fehérje gátolja. A  $\Phi 11$  fág fertőzés következtében a fág dUTPáz fehérjéje kölcsönhatásba lép az Stl fehérjével, ezáltal derepresszálja a SaPI DNS kifejeződését, amely elindítja a kivágás-replikáció-csomagolás ciklusát.

Munkám során a  $\Phi 11$  fág dUTPáz és az Stl fehérje tulajdonságait és a közöttük létrejött kölcsönhatás kialakulását különféle módszerek (spektrofotometria, fluorimetria, EMSA) felhasználásával jellemeztem. Mutáns enzimek alkalmazásával vizsgáltam a  $\Phi 11$  fág dUTPáz két jellemző szerkezeti elemének – a C-terminális karnak és a fajspecifikus inzert motívumnak – szerepét a szubsztráttal illetve az Stl-el való kötésben.

A katalitikus aktivitás mértéke a vad típusú és inzert mentes  $\Phi 11$  dUTPáz esetében hasonló, továbbá jól egyezik a humán vagy mikobaktérium (*Mycobacterium tuberculosis*) dUTPázok aktivitási adataival. Az inzert jelenléte illetve hiánya sem a dUTPáz által katalizált reakciót, sem az Stl inhibíciót nem befolyásolja, a szubsztrát kötésben a C-terminális kar vesz részt.

A dUTPáz és az Stl kölcsönhatását az Stl feltételezett DNS kötőhelyének jelenlétében figyeltem meg, amely szerint a dUTPáz-Stl komplex kialakulásának hatására az Stl leválik a DNS-ről, az inzert mentes dUTPáz esetében viszont az Stl-DNS kötés megmarad. Ezen eredmények alapján az inzert szerepét befolyásolja a DNS jelenléte a dUTPáz-Stl kölcsönhatás létrejötté során. A dUTPáz Stl DNS komplex jellemzéshez további vizsgálatok szükségesek.

## Újonnan fejlesztett funkcionális búzaőrlemény és egyéb, hagyományosnak tekinthető gabonaőrlemények táplálkozástani értékének összehasonlító vizsgálata

Nagy Mariann BSc. IV. évfolyam

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Bucsella Blanka** PhD. hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A búzaszemben a főkomponensnek számító fehérjék és szénhidrátok mellett számos értékes, sok esetben bizonyítottan egészségtámogató komponens található, mint pl. az élelmi rostok, fenolos komponensek, stb. A gabonaszemek (vagy bármilyen egyéb magok) szerkezetileg jól elkülöníthető részekre oszlanak: héj, csíra, endosperm, aleuron réteg. A fent említett értékes összetevők meghatározóan a héj közeli és a héj frakciókban (aleuronréteg, korpa, maghéj) találhatóak, melyek a jelenlegi nagyipari malmi technológiákban eltávolításra kerülnek. Ahhoz, hogy a búzaszemben lévő táplálkozástani értékpotenciált az eddigieknél jobban kiaknázzuk, a nagyipari őrléstechnológiák módosítására van szükség.

A BME-ABÉT részvételével futó konzorciumi kutatási projektben a Gyermelyi Zrt. malmában, a svájci Bühler cég közreműködésével továbbfejlesztették az őrlési technológiát, melynek eredményeképpen lehetővé vált élelmi rostban és egyéb funkcionális komponensekben lényegesen gazdagabb őrlemények előállítása.

A kutatási projekthez kapcsolódva feladatom a kísérleti búzaőrlemény meghatározó jelentőségű makro- és mikro-komponenseinek mérése, összehasonlítása, értékelése.

Munkám során a nyers beltartalmi adatokat (fehérje, zsír, élelmi rost tartalom, nedvesség, hamutartalom, stb.) szabvány módszerekkel határoztam meg, A fehérje frakciók és alegységek jellemzésére SE-HPLC és Lab-On-a-Chip módszereket használtam. Az aminosav tartalom jellemzését aminosav analízátorral végeztem. Az ásványi anyag összetétel meghatározása ICP-vel történt, az arabinoxilán arány meghatározása gázkromatográfiás analízist használtam, a  $\beta$ -glükán tartalom és a fenolos komponensek mérése pedig spektrofotométeres módszert alkalmaztam.

Eredményeim azt mutatják, hogy a kifejlesztett új búzaőrlemény nyersrost tartalma kiemelkedően magas a finomított búza és rozslisztek, valamint a teljes kiőrlésű zablisztekéhez képest. Ugyanezt tapasztaljuk a nyersfehérje és a nyerszsír összetételben, ahol még a teljes kiőrlésű búzaliszten is túltesz. A funkcionális komponenseket vizsgálva azt találtam, hogy a kísérleti őrlemény arabinoxilán tartalma összemérhető a teljes kiőrlésű búzalisztekével, a rozs és zablisztekéhez képest pedig jelentősen nagyobb. Végül az alkilrezorcín és a fenolos komponensek vizsgálata pedig azt mutatta, hogy az új őrlemény mindkét tekintetben lényegesen többet tartalmaz ezekből a funkcionális komponensekből, mint a többi liszt, egyedül a teljes kiőrlésű búzaliszt értékei közelítették meg az új kísérleti liszt eredményeit.

Összegzésül elmondható, hogy az új búzaőrlemény kiemelkedően magas nyersrost és funkcionális komponens tartalmú, és így jelentős egészségtámogató hatást várhatunk tőle. A finomított búzalisztekénél, a rozslisztekénél és a zablisztekénél ilyen szempontból összehasonlíthatóan jobb, a teljes kiőrlésű búzalisztekkel pedig legalább egy kategóriába sorolható.

Munkám elvégzését az „Egészségmegőrzés és hagyomány: alapanyag-, termék- és technológiafejlesztés a gabonavertikumban” c. (TECH\_08\_A/2-2008-0425), és a „Pannon búza fajták és fajtajelöltek nemesítése, termesztési és élelmiszeripari feldolgozási rendszerének fejlesztése”, (Tech\_09-A3-2009-0221) c. NTP kutatási projektek támogatása tette lehetővé. Emellett a téma kapcsolódik "Minőségorientált, összehangolt oktatási és K+F+I stratégia, valamint működési modell kidolgozása a Műegyetemen" c. projekt (TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002) szakmai célkitűzéseinek megvalósításához.

## A dehidroaszorbát és az elektrontranszport láncapcsolatának vizsgálata $\rho^0$ sejtekben

Dülk Metta MSc. II. évfolyam

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A fehérjék aktív szerkezetének kialakulásához elengedhetetlen azok megfelelő térbeli feltekeredése (foldingja). A harmadlagos szerkezetet gyakran a fehérjék cisztein oldalláncai között létrejövő kovalens kötések stabilizálják. A megfelelő oldalláncok közötti diszulfid-hidak kialakulásának folyamatát oxidatív foldingnak nevezzük. A folyamat során az –SH-csoportok elektronjai más, az oxidációt segítő fehérjéken keresztül eltávoznak, és egy végső elektron akceptorra (gyakran molekuláris oxigénre) kerülnek.

Eukarióta sejtekben jól ismert az endoplazmás retikulumban történő oxidatív folding folyamata, mely jórészt extracelluláris fehérjék diszulfid-hídjainak kialakításában vesz részt. Jóval kevésbé ismert a mitokondrium intermembrán részén működő mechanizmus, mely a citoplazma felől érkező mitokondriális fehérjék oxidálásában játszik szerepet. Többféle elmélet is létezik arra nézve, hogy az oxidáció során felszabaduló elektronok végül hová kerülnek. A legvalószínűbb szerint az elektronok a mitokondriális elektrontranszport láncba, végső soron pedig az oxigénre kerülnek.

Ennek vizsgálatára szerettem volna olyan sejt vonalakat (ún.  $\rho^0$ ) létrehozni, melyekben mitokondrium ugyan található, azonban az elektrontranszport lánc nem működik. Mivel a lánc komplexeinek bizonyos alegységeit a mitokondriális DNS kódolja, ezért ennek eliminálását terveztem. Megpróbáltam egy olyan kísérleti modellt beállítani, amely klasszikus etídium-bromidos kezeléssel teszi tönkre a mtDNS-t, míg a genomi DNS nem károsodik, annak nagyobb hibajavító képessége miatt. A kezelés hatékonyságát szemikvantitatív real-time PCR, valamint a sejt légzés-csökkenés detektálásának segítségével vizsgáltam.

A továbbiakban olyan kísérleteket terveztem, melyek során a C-vitamin oxidált formája, a dehidroaszorbát, mint alternatív elektron-akceptor szerepét igyekeztem tisztázni az oxidatív folding mechanizmusa során. Sejt légzés-vizsgálatoknál azt tapasztaltam, hogy DHA hozzáadására szignifikánsan csökken az oxigénfogyasztása a sejt kultúrában tenyésztett sejteknek. Egy másik fajta kísérletben, a  $\rho^0$  sejteket DHA-val inkubáltam hosszabb ideig. A sejt médium HPLC-vel történt analízise során megfigyelhető volt, hogy a DHA jelentős mértékben redukálódott aszorbáttá, míg ép mitokondriális elektrontranszport-láncot tartalmazó sejteknél ez nem volt jellemző.

Ezek az eredmények azokat az elképzeléseket támasztják alá, melyek a DHA alternatív elektron akceptor szerepét hangsúlyozzák a mitokondriális elektron-transzportlánc működése, így a mitokondriális oxidatív protein folding során.

## Döntéshozó rendszer fejlesztése rákos betegek molekulárisan célzott egyénre szabott terápiájához

**Kirsch Klára MSc. II. évfolyam**

Témavezető: **Dr. Peták István** tudományos igazgató  
KPS Orvosi Biotechnológiai és Egészségügyi Szolgáltató Kft.

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

Mára egyértelműen bebizonyosodott, hogy a rák genetikai eredetű betegség, amelyet génjeink mutációja okoz. Ez új irányvonalat adott az onkológiai diagnosztikának és a daganatellenes gyógyszerek fejlesztésének. A feladat az, hogy minden egyes beteg esetében megtaláljuk a molekuláris célpontot, ami meghibásodott és a célpontnak megfelelően gyógyszeresen gátoljuk az okozott sejtműködési szabályozási zavart. Az utóbbi 10 évben a célzott terápia kezdeti sikerei miatt rohamosan nőtt a molekuláris adatok halmaza és az új gyógyszermolekulákkal végzett klinikai vizsgálatok száma, amelynek befogadása az onkológus számára már szinte lehetetlen.

Célunk egy olyan döntéstámogató szoftver fejlesztése az onkológusok számára, ami a tumor biomarker profilja alapján prediktálja, hogy a kezeléshez melyik célzott gyógyszer lehet hatásos, és melyik nem. A rendszer alapját a TARGETED DRUG SENSITIVITY DATABASE™ képezi, amely irodalmi adatok alapján a szomatikus mutációk gyógyszerérzékenységre kifejtett hatását vizsgálja. A felépített információhalmaz folyamatosan bővíthető és hiánypótló, hiszen hasonló adatbázis még nem létezik [1]. Erre az adatbázisra egy olyan döntéshozó rendszer épül, amelynek feladata az, hogy a molekuláris diagnózis során talált biomarker mintázatnak megállapítsa a biológiai jelentőségét, és pozitív vagy negatív kapcsolatát az egyes gyógyszermolekulák hatékonyságával. A döntéshozó rendszer a TARGET-DRUG ASSOCIATION ANALYZER™, amelyet jelenleg 17 proto-onkogén és 1 tumorszupresszor gén valamint 20 célzott gyógyszermolekula alkot.

Jövőbeli tervek közé tartozik, hogy az adatbázist a lehető legtöbb onkogénre/tumorszupresszorra kiterjesztjük és bioinformatikai módszerekkel - fehérje szerkezet modellezéssel és gyógyszermolekula dokkolással - megpróbáljuk előre jelezni a gyógyszerérzékenységet azokban az esetekben is, amelyeknél még nem áll rendelkezésre kísérletes eredmény.

### Irodalom:

[1] Lahti JL, Tang GW, Capriotti E, Liu T, Altman RB. Bioinformatics and variability in drug response: a protein structural perspective. J R Soc Interface. 2012 Jul 7;9(72):1409-37.

## Másodlagosan keletkező glutamát kimutatása és hatása *in vitro* neurotoxicitási tesztekben

Hámornik Gábor Bence MSc. II. évfolyam

Témavezetők: **Dr. Herberth Balázs** tudományos főmunkatárs

EGIS Gyógyszergyár Nyrt.

**Kaufmanné Bojti Erzsébet** fejlesztő analitikus

EGIS Gyógyszergyár Nyrt.

Konzulens: **Dr. Deák Veronika** egyetemi adjunktus

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az EGIS Preklinikai Kutatási Főosztályának Molekuláris Farmakológiai laboratóriumában célunk neurodegeneratív megbetegedések *in vitro* modellezése, neuroprotektív hatóanyagjelölt molekulák keresésének érdekében. A különböző neurodegeneratív megbetegedésekre specifikus elsődleges hatások, mint tápanyag és oxigén hiánya (stroke), proteopatikus megbetegedéseket okozó toxikus fehérjék koncentrációjának megnövekedése (béta-amyloid, prion), bakteriotoxinok (fertőzések) vagy fizikai sérülések stb., olyan celluláris stressz folyamatokat indítanak be, amelyek további sejtpusztulást előidéző, másodlagos faktorok keletkezését eredményezik.

A sérült szövetből endogén módon felszabaduló másodlagos stresszor ágensek, mint a reaktív oxigén gyökök megnövekedett szintje, gyulladáshoz vezető faktorok felszabadulása vagy az extracelluláris glutamát koncentráció megnövekedése a toxicitás későbbi fázisaiban elsődlegesen felelősek lehetnek az idegsejtek pusztulásáért. Az elsődlegesen és másodlagosan kialakuló toxikus folyamatok később egymással párhuzamosan és egymást indukálva is lejátszódhatnak, sőt az egyes esetekben közvetlen kiváltó (elsődleges) hatás más kórképben másodlagos tényezőként jelenhet meg. Ezért az egyes hatások kezelésére specifikusan alkalmas gyógyszerek kifejlesztéséhez olyan kísérletes rendszerek szükségesek, ahol az idegsejteket károsító összetett folyamatok egymástól jól elkülöníthetőek.

Feladatom az egyik legjellemzőbb másodlagos stresszorként megjelenő molekula a glutaminsav szintjeinek mérésére alkalmas analitikai módszer kidolgozása volt különböző összetételű és összetettségű extracelluláris oldatokban, lehetővé téve a glutamát felszabadulás mértékének direkt meghatározását. A glutaminsav a központi idegrendszerben a legfőbb izgató, azaz excitátoros neurotranszmitter szerepét tölti be. Ugyanakkor a megnövekedett extraszinaptikus koncentrációja az idegsejtek túlingerlését okozza, ami végső soron a neuronok pusztulásához vezet. Ez a folyamat az excitotoxicitás. Az excitotoxicitás szerepet játszik számos olyan napjainkban elterjedt neurodegeneratív megbetegedés patomechanizmusában, mint a stroke, az Alzheimer- vagy a Parkinson-kór.

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

## **Gabonák malmi frakcióinak vizsgálata infravörös spektroszkópiai és mikroszkópiai módszerekkel**

**Izsó Eszter MSc. II. évfolyam**

Témavezető: **Dr. Gergely Szilveszter** egyetemi adjunktus  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Dr. Salgó András** egyetemi tanár  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A növényi eredetű komponensek makro- és mikroszkópos infravörös (IR) vizsgálati módszereinek kidolgozása munkám alapvető célja, a komponensek kémiai tulajdonságainak, valamint a spektroszkópiai és mikroszkópiai mérési eljárások megismerésén keresztül. A közeli és közép IR spektroszkópiai módszerek információt szolgáltathatnak a vizsgált objektum adott komponensének meglétéről, illetve mennyiségéről. A mikroszkópia eszköztárával kiegészülve az összetevők eloszlásáról is képet kaphatunk.

Munkám során fajtaazonos búza, ipari körülmények között előállított, adott napok 8, 12, 16, 20, 24, 4 órákor vett standard malmi frakcióit (BL55, BL80, BL112, TL50) és egy „búza kísérleti lisztet” (BKL) vizsgáltam. A fő kémiai összetevőket (pl. keményítő, fehérje, lipid) és a fizikai tulajdonságokat (szemcseméret) elemeztem. Szoros összefüggés mutatkozott a spektroszkópiai mérési eljárásokkal nyert, különböző kemometriai módszerekkel (pl. főkomponenselemzés, klaszterelemzés) feldolgozott adatok – mint kémiai és fizikai ujjlenyomatok – és a malmi technológiai műveletek között. Az egymást rendszeresen követő mintavételezési időpontok miatt olyan kérdésre is választ találtam, hogy az adott frakciók minősége mennyire egyenletes, ill. az alkalmazott technológia mennyire stabil. A klasszikus spektroszkópiai módszerek eredményeit IR mikroszkópiával is nyomon követtem, mely ezen a kutatási területen még új technikának számít.

## **Biofilm alapú szennyvíztisztító rendszer és matematikai modelljének vizsgálata, modellparaméterek meghatározása**

**Eller Nikolett MSc. I. évfolyam**

Témavezető: **Szilágyi Nikolett** okleveles környezetmérnök  
Organica Technológiák Zrt.

Konzulens: **Dr. Csikor Zsolt** egyetemi docens  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A biofilmes folyamatok napjainkban ismételten egyre nagyobb szerephez jutnak a szennyvíztisztítási technológiákban, mivel ezen technológiák környezetbarát és kevésbé energiaigényes tisztítást tesznek lehetővé. A biofilm reaktorok nagy előnye, hogy a rögzített biomassza révén nagyobb iszapkor érhető el, mint a hagyományos rendszerekben, ezzel kedvezőbb körülményeket teremtve a nehezebben növő, pl. autotróf szervezetek számára.

A munkám során az Organica Technológiák Zrt. által fejlesztett speciális, polipropilén hordozószöveteken kialakult biofilm mennyiségét vizsgáltam egy 168 napig tartó kísérlet sorozatban. A vizsgálatokat nyolc darab sorba kapcsolt biofilm reaktort tartalmazó kaszkád reaktorban végeztem el. A kísérlet ideje alatt folyamatos monitoringgal, heti két alkalommal elvégzett, részletes laboratóriumi analízissel követtem nyomon a kaszkádelemek reaktorvizének paramétereit (kémiai oxigénigény, nitrogénformák, pH és lebegőanyag tartalom), valamint adott időközönként a reaktorokból egy-egy textilhordozót kiemelve, gravimetriás módszerrel számoltam a biomassza mennyiséget illetve a biofilm vastagságot és annak változását.

Dolgozatom fő célkitűzése a speciális biofilmben található baktériumok kinetikai tulajdonságainak meghatározása volt. Erre azért volt szükség, mert a biofilm modell paraméterei (pl. leválási és megkötődési koeficiens, maximális biomassza mennyiség stb.) eltérnek a különböző technológiák esetében, így azt minden új technológia tervezésénél kísérleti módszerekkel, laboratóriumi körülmények között meg kell határozni, annak érdekében, hogy egy ilyen technológia később pontosan tervezhető legyen.

A biofilm modell paramétereit a félüzemi méréseim során kapott biomassza mennyiségből határoztam meg, majd ezeket a koeficienset behelyettesítve a technológia biofilm modelljébe, elvégeztem egy az adott időszakra vonatkozó szimulációt a GPS-X 6.0 szoftvercsomag segítségével. Végezetül pedig a szimuláció eredményeit összehasonlítottam a laboratóriumi méréseim eredményével.

A TDK munkám további célja, a korábbiaktól eltérő biofilm-struktúrájú Organica Technológia hatékonyságának tesztelése és működésének nyomon követése volt. Ennek érdekében elvégeztem egy üzemmenet jellemzést is az adott időszakra, amely során a technológia nitrifikációs hatékonyságát és szerves anyag eltávolítását vizsgáltam.



## Mezőgazdasági melléktermékek enzimes hidrolízise és a folyamat kinetikai modellje

Gubicza Krisztina BSc. III. évfolyam

Témavezető: **Dr. Barta Zsolt** egyetemi tanársegéd  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

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

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

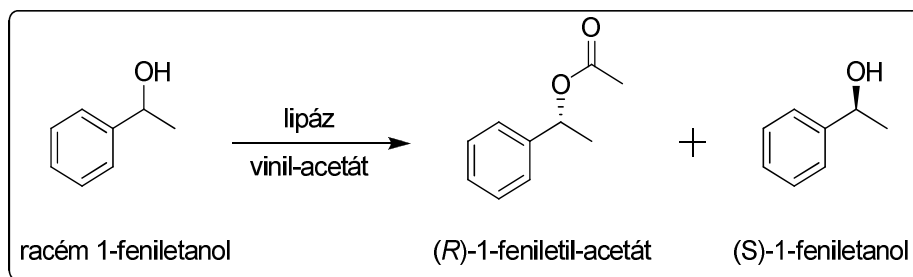
## Szilikagélek felületmódosítása és alkalmazása lipázok szelektív adszorpciójára

Abaháziová Emese MSc. II. évfolyam

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

Konzulens: **Boros Zoltan** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

TDK munkám célja felületmódosított szilikagél alapú hordozók fejlesztése és ezek alkalmazhatóságának tanulmányozása lipázok adszorpciójára. A téma keretében szilikagél hordozók felületmódosítását végeztem el különböző organoszilánokkal, mely során mintegy 20 különböző szilika alapú adszorbenst állítottam elő. A kész hordozókra különböző enzimeket rögzítettem (*Burkholderia cepacia* lipáz, *Pseudomonas fluorescens* lipáz, *Candida antarctica* A és B lipáz), majd az enzimmészítményeket a racém 1-feniletanol kinetikus rezolválásában vizsgáltam enantioszelektív acilezési reakción keresztül.



1. ábra: A racém 1- feniletanol kinetikus rezolválása

A felületmódosított szilikagélek alkalmasak lehetnek enzimek szelektív adszorpciójára is. Mivel a különböző lipázok különböző mértékben adszorbeálódtak az általam elkészített felületmódosított hordozókra, ezért kísérleteket végeztem különböző lipáz keverékek szelektív adszorpciójára is. Az eredmények azt mutatják, hogy ezek az adszorbensek alkalmasak lehetnek ilyen típusú enzimmtisztítási műveletekre. A munka távlati célja enzimek kinyerése adszorpcióval közvetlenül fermentációs elegyekből, majd az így nyert enzimmészítmények felhasználása biokatalizátorként sztereoszelektív reakciók kivitelezésére szakaszos és folytonos, átfolyásos reaktorokban.

## Nagy szervesanyag-tartalmú gyógyszeripari hulladékvizek biológiai ártalmatlanítása és hasznosítása

**Torma Csilla Zsófia MSc. II. évfolyam**

Témavezető: **Dr. Tardy Gábor Márk** egyetemi adjunktus  
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Magyarországon a gyógyszeripari és finomvegyipari szennyvizek veszélyes hulladéknak minősülnek, kezelésük elsősorban hulladékégetőkben történik. A veszélyes hulladék égetőben történő megsemmisítése költséges eljárás, a kezelés kiadásait tovább növeli a szállítási költség, mivel az égetést általában nem a hulladék keletkezési helyén végzik. Ezen felül a veszélyes hulladékok tárolására, szállítására igen szigorú biztonságtechnikai előírások vonatkoznak.

A magyarországi szennyvíztisztító telepek az alacsony szervesanyag-tartalmú kommunális szennyvizek okán gyakran küzdenek denitrifikációs szénforrás hiánnyal, amelyet a megfelelő technológiai pontokon pl. metanol vagy ecetsav adagolásával küszöbölnek ki, ez viszont jelentősen megnöveli a telepek üzemeltetési költségét. Ha a szükséges pótszénforrás egy részét a megfelelően minősített, ill. előkezelt gyógyszeripari vagy finomvegyipari szennyvizekkel tudnánk biztosítani, csökkenne a pótszénforrásra fordított költség, és egyúttal a veszélyes hulladék égetőben történő kezelésének kiadásaitól is eltekinthetnénk. A hulladék újrahasznosításával pedig a gyártási technológia környezeti fenntarthatóságát segítjük elő. A kutatás célja egy olyan minősítési eljárás sorozat kidolgozása volt, amellyel az egyes vegyipari hulladékvizekről megállapítható, hogy biodegradálhatók-e és ez alapján lehetséges-e azok biológiai eliminációja, valamint hasznosítása.

Munkám során a korábban a kutatócsoportban kidolgozott respirometriás mérési eljárás segítségével három – jelenleg veszélyes hulladékként ártalmatlanított – gyógyszeripari eredetű nagy szervesanyag-tartalmú hulladékvíz biológiai lebonthatóságát vizsgáltam. Az eredmények arra utalnak, hogy megfelelő körülmények között két vizsgált szennyvíz szervesanyag-tartalma hatékonyan eltávolítható biológiailag, és az egyik akár egyedüli szénforrásként is alkalmazható. Ez utóbbi szennyvíz anoxikus körülmények között a denitrifikációt is elősegítette, ami a pótszénforrásként történő hasznosítás lehetőségét is felveti. További vizsgálataim eredményei alapján arra lehet következtetni, hogy egyes gyógyszeripari és finomvegyipari szennyvizek toxikus vagy nem biodegradálható komponenseiből megfelelően optimalizált kezelési eljárások – pl. nedves oxidáció – után képződő szerves savak részben helyettesíthetők a szennyvíztisztítási eljárások során szükségszerűen alkalmazott pótszénforrásokat.

## Kukoricarost arabinóz tartalmának hidrolízise kémiai és biokémiai módszerekkel

Gál Boglárka BSc. IV. évfolyam

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Fehér Csaba** PhD. hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A nedves őrléses kukoricafeldolgozásból származó kukoricarost ideális alapanyag lehet számos értéknövelt termék előállítására. A kukoricarost kifejezés a kukorica maghéjat, és annak belső rétegéhez, az aleuronhoz tapadt keményítőt foglalja magába. A magháj lignocellulózból épül fel, mely hemicellulózt, cellulózt és lignint tartalmaz. Jelenleg, mint mezőgazdasági melléktermék, állati takarmányként és tüzipelletként kerül értékesítésre.

A kukorica magháj egyik lehetséges értéknövelt felhasználása a magháj hemicellulóz frakcióját alkotó 2 fő komponens, a xilóz és arabinóz (szelektív) kinyerése révén valósítható meg. Az arabinóz mind az élelmiszeripar, mind a gyógyszeripar számára nagy potenciállal rendelkező alapanyag, a xilózból pedig értékes xilit állítható elő. Dolgozatom témája a hemicellulóz frakcióból történő arabinóz hidrolízis. Ennek megvalósítása történhet híg savas hidrolízissel, mellyel kapcsolatban jelenleg is számos kutatás folyik. Az elvárt szelektivitás tekintetében az enzimes hidrolízis kiemelkedő lehetőségekkel bír, mellyel kapcsolatban azonban nem találtam irodalmi adatokat.

A keményítőtmentesített magháj savas kezelését 100 °C-on, két változó, a savkoncentráció (0-0,1 N) és az idő (5-15 perc) függvényében vizsgáltam. A kísérleteket másodfokú kísérleti terv szerint végeztem szerves (borostyánkősav) és szervetlen sav (kénsav) jelenlétében. Ezen felül kénsavas hidrolízis ammóniás áztatással történő előkezeléssel kombinált hatását is vizsgáltam. A kísérleteket az arabinóz és xilóz konverzió tekintetében, statisztikai módszerek segítségével értékeltem.

A kísérleti terv szerint elvégzett ammóniás áztatás hatékonyságát enzimes bonthatóság alapján értékeltem. Az előkezelést 8, 15 és 22%-os ammónia-oldattal 4, 6 illetve 8 órán át végeztem. Az ezt követő enzimes hidrolízishez négy, a Novozymes által forgalmazott ipari enzimek készítmény áll rendelkezésemre: Hemicelluláz, Xilanáz, Enzim Komplex és HTec. A megfelelő enzimek kiválasztásához, az enzimdózis és pH meghatározásához két, a hemicellulóz hidrolízisét végző enzim aktivitását mértem a pH függvényében (pH=5-9), mind a négy enzimek esetében. Az  $\alpha$ -arabinofuranozidáz, mely képes az arabinóz szelektív hidrolízisére, az oldalláncokban lévő arabinózt hasítja. Az endo-1,4- $\beta$ -xilanáz enzim aktivitásának ismerete a szelektivitás szempontjából lényeges, ugyanis jelentős szerepet játszik a xilán főlánc bontásában. A szelektív arabinóz kinyerés szempontjából az az enzimek készítmény megfelelő, melynek egy adott pH-n az  $\alpha$ -arabinofuranozidáz aktivitása kellően nagy, endo-1,4- $\beta$ -xilanáz aktivitása ezzel szemben a lehető legalacsonyabb. A négy enzimek készítmény közül a HTec és a Hemicelluláz aktivitására kaptam kielégítő eredményeket. A hidrolízishez mindkét enzimet 8-as pH-n alkalmaztam. Az enzimes kezelés során a kezelési idő függvényében mértem az arabinóz és xilóz konverziót. Az eredményeket HPLC-vel nyomonkövetve a kapott adatok Statistica programmal kerültek kiértékelésre.

## **Terner szol-gél rendszerekbe rögzített lipázok szisztematikus optimalizálása és felhasználhatósága**

**Nagy Flóra BSc. IV. évfolyam**

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

Konzulens: **Weiser Diána** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

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

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

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

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

## Új gyógyszer- technológiai eljárások fejlesztése probiotikumok szilárd formulálására és stabilizálására

**Tobak Teodóra** MSc. I. évfolyam

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**Dr. Suhajda Ágnes** tudományos munkatárs

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulensek: **Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi tanársegéd

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**Wagner István** PhD. hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

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

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

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

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

## Termofil fonalas gombák tenyésztésének optimalizálása

Kisfaludy Anna Márta MSc. II. évfolyam

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

Konzulensek: **Dr. Bóday Viktória** kutatási vezető  
Fermentia Kft.  
**Boros Zoltan** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Manapság az enzimek felhasználási köre egyre bővül az ipar számos területén, a szerves kémiai szintéziseknél (optikai izomerek, detergensok, gyógyszerek, stb.), a klinikai diagnosztikában és az élelmiszeranalitikában egyaránt. Az enzimek alkalmazási előnyei között szerepel a nagyfokú specifitás, az általában enyhe reakciókörülmények és a reakciótermékek biodegradábilis tulajdonsága, ezáltal a környezetszennyezés kockázatának kizárhatósága.

Az eddig ismert mintegy ötezer enzimből mindössze száz körül van azoknak a száma, amiket a mindennapi gyakorlatban illetve ipari katalízis céljából használunk fel. Ennek oka lehet, hogy a legtöbb enzim felhasználási körülményeit még nem sikerült hatékonyan optimalizálni.

Az enzimek szintetikus úton nem állíthatók elő, ám a törzsgyűjteményekből beszerezhető mikroorganizmusok az enzimek kinyerésének végtelen tárházát nyújtják. Egy adott enzim termelése géntechnikai vagy molekuláris biológiai eljárásokkal még gazdaságosabbá tehető.

Munkám célja volt egy szintetikus biotranszformációkban hatékonyak és rendkívül szelektívnek bizonyult termofil fonalas gomba tenyésztési körülményeinek optimalizálása, különös tekintettel a fermentáció idejére, a tápoldat összetételére, a fermentáció befejeztével a fermentlé feldolgozására és ez által az enzimmészítmény kinyerésére, illetve ennek kiegészítéseként az aktív fehérjefrakció felületmódosított szilika hordozóra történő rögzítése. A szokásos rázatott lombikos módszer mellett a tíz literes fermentorokban történő tenyésztés lehetővé tette továbbá a pH és oldott oxigén mennyiség változásának követését, valamint választ kaphatunk a fermentációk paramétereinek hatására (keverés, levegőztetés, fermentációs idő, oltóanyag kora) is.

Az elkészült mintákat a racém 1-feniletanol enantiomerszelektív enzimatis acilezési reakciójával tesztelve az eredmények értékelésénél a konverziót, az enantiomer szelektivitást és a specifikus enzimaktivitást vettük figyelembe.

## **Olvadék alapú elektrosztatikus szálképzés alkalmazása a gyógyszer technológiában**

**Balogh Attila MSc. II. évfolyam**

Témavezető: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
**Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi tanársegéd  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszeriparban egyre növekvő igény mutatkozik a folyamatos technológiák alkalmazására. Az elektrosztatikus szálképzés az egyik olyan lehetőség, amely meg tud felelni a gyógyszeripari elvárásoknak a gyógyszerformálás területén. A technológia elvi alapja, hogy nagy elektromos térerősség hatására kialakuló Coulomb-erő képes polimer oldatokból és olvadékokból szálakat kihúzni, amik a gyűjtő felé haladva elvékonyodnak és megszilárdulnak. Az így kialakított szövedékek szálainak átmérője elérheti a szubmikronos mérettartományt.

Az oldószeres elektrosztatikus szálképzés alkalmazásának egyik előnye, hogy az oldószer rendkívül gyorsan történő elpárolgása következtében az oldott hatóanyag amorf formában marad a polimer mátrixban, ezáltal rossz vízoldhatóságú kristályos hatóanyagok kioldódási sebessége megnövelhető, amelyet tovább fokoz a szálak nagy fajlagos felülete.

Az olvadék alapú elektrosztatikus szálképzéssel elkerülhető a nagy mennyiségű oldószer felhasználása és az ezzel járó robbanásveszély. A termelékenység is javítható az oldószeres elektrosztatikus szálképzéshez képest, ipari alkalmazását megkönnyítheti a viszonylag egyszerű méretnövelhetőség (extrúderrel történő összekapcsolás). Ez a tématerület ez idáig kevésbé vizsgált, és nem találni publikációt olvadék alapú szálképzéssel előállított gyógyszerformákról.

Munkám során olvadék alapú elektrosztatikus szálképzéssel állítottam elő nem szőtt szövedékeket különböző polimerek felhasználásával. A modellhatóanyag a rossz vízoldhatósággal rendelkező vérnyomáscsökkentő hatású carvedilol volt. Összehasonlítási alapként oldószeres szálképzéssel előállított szálak és az extrudált termékek szolgáltak. Az olvadék alapú elektrosztatikus szálképzéshez építettem egy laboratóriumi vizsgálatokra alkalmas adagoló berendezést, amelynek tervezésekor szem előtt tartottam a lehető legkisebb hőstressz biztosítását, ezért az olvadék hőmérséklete két zónában állítható. A készülék emellett képes széles tartományban nagy felbontással változtatni az olvadék térfogatáramát.

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



## Foszfónátok és foszfinátok alkoholízise mikrohullámú körülmények között

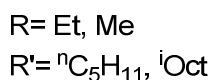
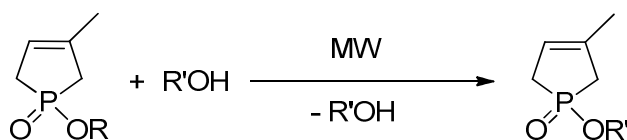
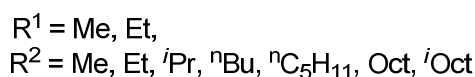
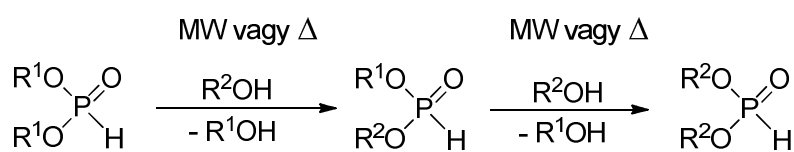
Tajti Ádám BSc. IV. évfolyam

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

Konzulens: **Bálint Erika** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A „zöldkémiai” kutatások egyik fontos célja környezetbarát szintézismódszerek kidolgozása. Ezen célok megvalósításához megfelelő eszköz lehet a mikrohullámú technika (MW), hiszen alkalmazásával a kémiai átalakítások gyorsabbá és szelektívebbé tehetők, illetve elkerülhető az oldószerek és katalizátorok használata.

Munkánk során különböző dialkil-foszfítok (*H*-foszfónátok) és gyűrűs foszfinátok alkoholízisét vizsgáltuk, melyek fontos kiindulási anyagok a foszfororganikus kémiában. Modellvegyületként különféle dialkil-foszfítok (dietyl- és dimetyl-foszfít), illetve gyűrűs foszfinátok (1-etoxi-, és 1-metoxi-3-foszfólén-oxid) szolgáltak. Az alkoholíziseket feleslegben vett alkoholokkal valósítottuk meg, katalizátor nélkül MW körülmények között. Összehasonlítóképpen a reakciókat hagyományos körülmények között is elvégeztük. A dialkil-foszfítok alkoholízise két lépésben játszódott le. A körülményektől függően a vegyes származékok domináltak, vagy a teljesen átésztereződött termék képződött. A vegyes dialkil-foszfítok különösen értékes intermedierek, a bennük lévő P-kiralitáscentrum miatt.



## Antivirális hatóanyag-tartalmú gyógyszerkészítmény fejlesztése és biofarmáciai vizsgálata

Zsóka Péter MSc. II. évfolyam

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

Konzulens: **Dr. Máthé Tibor** TFO osztályvezető  
TEVA Gyógyszergyár Zrt.

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

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

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

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

## Fertőzésgátlás cukorcirok mikroszűrése esetén

Géczi Nikoletta BSc. V. évfolyam

Témavezető: **Dr. Cséfalvay Edit** egyetemi adjunktus

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Dr. Suhajda Ágnes** tudományos munkatárs

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Hazánkban a cukorcirok termesztés a jövőben egyre nagyobb szerephez juthat. A már meglévő agrártechnológia alkalmazásával és a növény betakarítási igényeihez igazított technológia alkalmazásával egyszerűen termesztethető.

A növény szárából kiperéselhető igen magas cukortartalmú lé élelmiszeripari és a legújabb kutatások szerint energetikai célokra egyaránt felhasználható.

A dolgozatomban egy biofinomító alapanyagának alkalmas, nagy cukor tartalmú cukorcirok növény préselésével kapott présle betöményítését vizsgáltam. A présle betöményítésének első lépéseként a centrifugálással távolítottam el a présleben található nem vízdoldható keményítőt és a nagyobb rostanyagokat. A centrifugálási felülúszót dead-end mikroszűréssel tisztítottam tovább a lénél kisebb sűrűségű úszó daraboktól. A következő lépésben a lebegőanyag mentes kolloid oldat mikroszűrését végeztem el cross-flow üzemmódban. A kapott felülúszó mikroszűrése során három különböző hatású fertőtlenítőszer alkalmaztam a berendezés tisztításához és a szűrlet mikrobamentesítéséhez. A mikrobák szaporodási körülményeit befolyásoló abiotikus környezeti tényezők lehetnek fizikai vagy biokémiai faktorok. Az alkalmazott fertőtlenítőszer ezek alapján választottam. A 70 m/m%-os *etil-alkohol*, mely nagyon erős baktericid hatású; az erősen savas, 1,7-es pH-jú *citromsavoldat*, ami számos mikroorganizmus szaporodását gátolhatja; és végül a *Sanosil super 25 Ag*, mely hidrogén-peroxid és ezüst komplexét tartalmazza mely mellékhatások nélkül elpusztít valamennyi patogén baktériumot, amőbát, gombát, vírust, penészt. Hatásosságukat a szűrést jellemezhető fluxusok megállapításával igazoltam.

A mikroorganizmusok jelenlétének igazolására hígítási lemezöntést végeztem. A centrifugálási felülúszóból és a mikroszűrés permeátumaiból ellenőrzés céljából mintát vettem. Az alkalmazott táptalajokat tekintve kétféle, maláta és peptonnal emésztett húslé alapú, úgynevezett Nutrient táptalajt használtam. A maláta agar élesztő gombák, míg a húslé alapú táptalaj a baktériumok kimutatására szolgál.

## Carvedilol kristályosítása segédanyagokkal

Szigeti Szilvia BSc. IV. évfolyam

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

Konzulens: **Pataki Hajnalka** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszerhatóanyagok készítménytechnológiai segédanyagokkal történő kristályosítására a szakirodalomban csupán kevés publikáció található, melyek alapján azonban ígéretes technológia a hatóanyag kedvező morfológiai tulajdonságainak kialakítására. A különféle segédanyagok a hatóanyag szemcseméretét, habitusát, ritkán kristályszerkezetét is képesek befolyásolni, így elősegítve az egyszerűbb formulálást. A segédanyagok kristályosítás során fellépő kölcsönhatások értelmezésére javasolt mechanizmusok azonban bizonyíték hiányában, sok esetben megkérdőjelezhetőek. Ennek megoldására szolgál a folyamatok valós idejű Raman spektrometriás detektálása, amely harmonizál a gyógyszeriparban megvalósítandó PAT (Process Analytical Technology) irányelveivel is. A PAT olyan technológiák kiépítésére vonatkozik, melyben a folyamat szabályozása valós idejű detektáláson alapul, érzékeny analitikai berendezésekkel történik így biztosítva az állandó termékminőséget. A fentiek értelmében TDK munkám célja formulálási segédanyagok hatóanyag morfológiamódosító hatásának tanulmányozása egy kiválasztott modellhatóanyag példáján, továbbá a folyamatok valós idejű Raman spektrometriás nyomon követése az esetlegesen bekövetkező folyamat-kinetikai változások feltárására és megértésére.

A szakirodalomból ismert segédanyagok közül a kísérleteim során polimereket, cellulózzármazékokat, cukoralkoholokat és egy felületaktív anyagot használtam carvedilol hatóanyag hűtési kristályosításában. A folyamatokat nem invazív in-line Raman spektrometriás detektálással vizsgáltam. Az így nyert spektrumok feldolgozásával illetve egyéb analitikai vizsgálati módszerekkel (por-röntgen diffrakció, Raman mikrospektrometria, differenciális pásztázó kalorimetria, polarizációs fénymikroszkóp, pásztázó elektronmikroszkóp) mind a kristályokról, mind a folyamatról értékes információkat kaptunk. A munka során sikerült a segédanyag nélküli, formulálási szempontból igen kedvezőtlen tús habitusú carvedilol gördülékenységét nagymértékben javítani. A polivinil-pirrolidon kristályosodás gátló, illetve orientációs hatásának köszönhetően pedig a carvedilol egy „szferolitként” definiálható, összetett kristály-aggregátumként vált ki az oldatból.

## **Butoxi - etanol és diaceton - alkohol CO<sub>2</sub>-os oldatainak nagynyomású fázisegyensúlyi mérése és viszkozitásainak becslése**

**Lévai György MSc. II. évfolyam**

Témavezető: **Közelné dr. Székely Edit** egyetemi docens  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Konzulens: **Dr. Simándi Béla** egyetemi tanár  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Az iparban egyre szélesebb körben terjednek azok az eljárások, amelyek valamilyen szuperkritikus oldószert használnak fel különféle termékek előállításának folyamatában. Az egyik legkedveltebb szuperkritikus állapotban felhasznált oldószer a szuperkritikus szén-dioxid (scCO<sub>2</sub>), mivel számos előnnyel rendelkezik egyéb oldószerekkel szemben. Alacsony hőmérsékleten, már 31°C fok felett szuperkritikus állapotba hozható, valamint sűrűsége nagy és a nyomással tovább növelhető, így oldóképessége jó és jól befolyásolható a nyomással és a hőmérséklettel. Biztonságtechnikai szempontból is előnyös, hiszen nem toxikus, nem explozív, nem környezetszennyező. Ráadásul nagy tisztaságban könnyen, és így olcsón hozzáférhető. Használható többek között a gyógyászati- és vegyiparban: különböző íz-, illat-, és biológiailag aktív komponensek kinyerése szuperkritikus extrakcióval.

A scCO<sub>2</sub>-os technológia szélesebb körben történő alkalmazásához elengedhetetlen, hogy több anyagot tudjunk scCO<sub>2</sub>-os közegben oldatba vinni. A szén-dioxid apoláris oldószer, polaritását segédoldószerek, úgynevezett entrainerek szabályozott koncentrációkban történő hozzáadásával meg lehet növelni. A scCO<sub>2</sub> oldószer polárosabbá tételére szükség van pl.: a szuperkritikus kromatográfiában az eluenserősség szabályozására, vagy a gyógyszeriparban a különleges morfológiájú kristályok előállítása során.

Munkám során két lehetséges entrainer komponenst elegyítettem 1-40 w/w% entrainer koncentráció tartományban scCO<sub>2</sub>-dal, és végeztem fázisegyensúlyi méréseket 35-70°C hőmérséklet határok között. A fázisegyensúlyi méréseket egy nagynyomású, szabályozható mintatérfogató, termosztált optikai cellában végeztem. A relatív viszkozitás értékeket egy tanszéki fejlesztésű, esőtestes, nagynyomású viszkoziméterben mértem, az entrainer - scCO<sub>2</sub> oldatok 5-40 w/w%-os összetétel tartományában. A viszkozitás-mérések megbízhatóságát a referenciaként használt scCO<sub>2</sub> 200,3 ± 0,5 bar 65 ± 0,2°C-ra állított oldatának többszöri, különböző napokon történő viszkozitás-méréseivel ellenőriztem.

Mind a butoxi-etanol (2-butoxi-etanol) mind a diaceton-alkohol (4-hidroxi-4-metil-2-pentanon) oldatainak az opálosodási nyomása 70-150 bar nyomástartományba esik a vizsgált koncentráció- és hőmérséklettartományban. Adott koncentrációnál a homogén fázis fenntartásához szükséges minimális nyomás a hőmérséklettel nő. A relatív viszkozitás-, valamint az oldatsűrűség-értékek a növekvő entrainer koncentrációval jelentős mértékben nőnek.

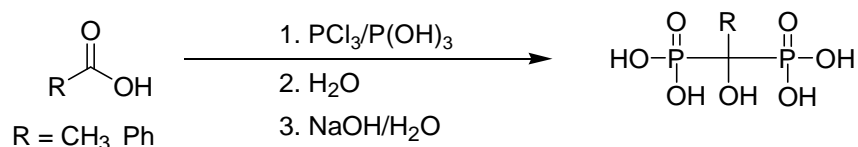
## Biszfoszfonátok szintézisének vizsgálata

Nagy Dávid Illés BSc. IV. évfolyam

Témavezető: **Dr. Keglevich György** egyetemi tanár  
 BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
**Dr. Grün Alajos** egyetemi adjunktus  
 BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Konzulens: **Kovács Rita** PhD. hallgató  
 BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A biszfoszfonátokat a posztmenopauzás oszteoporózis (csontritkulás), Paget-kór, emlőkarcióma és tumorindukált hypercalcaemia kezelésére alkalmazzák, de újabban egyre több adat szól a direkt daganatellenes hatásukról is, így növekszik irántuk az érdeklődés.

Az irodalomban leírt eljárásokban a szükségesnél nagyobb mennyiségben alkalmaztak foszfortartalmú reagenseket ( $\text{PCl}_3$  és  $\text{H}_3\text{PO}_3$ ), ami csak növelte a ballaszt mennyiségét és felesleges környezeti terhelést eredményezett.<sup>1</sup> Kutatómunkám célja 1-hidroxietilidén-1,1-bisz(foszonsav) [Etidronát] és 1-hidroxi-1-fenilmetilén-1,1-bisz(foszonsav) [Fenidronát] szintézisének a tanulmányozása.



Fel kellett derítenem a megfelelő reakció körülményeket, a reagensek optimális arányát. A tanszéken más biszfoszfonátokra kidolgozott eljárást<sup>2</sup> adaptálnom kellett saját vegyületeimre. Tanulmányoztam a savkloridon keresztüli, illetve a megfelelő észterekből kiinduló reakció utakat is. A biszfoszfonátok szintézisére az eddigi tapasztalatok szerint a legmegfelelőbb oldószernek a metánszulfonsav bizonyult. Munkám során egyéb oldószerben, oldószermentes, illetve mikrohullámú körülmények között is megkísérletem végrehajtani a reakciót.

1. S. Garadnay, A. Grün, Gy. Keglevich, J. Neu; *Magyar szabadalmi bejelentés*, HUP1100071, **2011**.
2. Gy. Keglevich, A. Grün, K. Arady, S. Garadnay, I. Greiner; *Tetrahedron Lett.*, **2011**, 52, 2744-2746.

## Oldószerregeneráló oszlop tervezése

Győrffy Péter Ákos MSc. II. évfolyam

Témavezető: **Dr. Busa Csilla** Head of Process Engineering  
Sanofi

Konzulensek: **Dr. Kemény Sándor** egyetemi tanár  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék  
**Vörös Attila** gyakornok  
Sanofi

A TDK munkám célja az volt, hogy megállapítsam, hány elméleti tányérra van szükség ahhoz, hogy egy 30 m/m% (58 n/n%) körüli víztartalmú acetón-víz elegy rektifikálása után 0,2 m/m% (0,64 n/n%) víztartalmú technikai acetónhoz jussunk, és milyen refluxarány mellett kell végezni a rektifikálást. Ehhez kísérleteket végeztem egy rendezett töltetű rektifikáló oszloppal, amelynek az elméleti tányérszáma 10 a gyártó által mellékelte diagramok alapján.

A kísérletek tanulsága szerint a kívánt elválasztáshoz valószínűleg kétszer akkora tányérszámú oszlopra van szükség, mint amennyi a vizsgált oszlop tányérszáma, tehát körülbelül 20-ra. Ez megegyezik a szakirodalomból származó értékkel, amely szerint  $R=5$  mellett 20 elméleti tányérra van szükség. A grafikus szerkesztés alapján az elválasztáshoz 12 elméleti tányérra van szükség 10-es refluxarány mellett, és 15-re 5-ös refluxarány mellett, de ezek az értékek a közelítés pontatlanságai miatt valószínűleg alacsonyabbak a valósnál. Számításokat végeztem még az Aspen Batch Distillation V7.3 programmal, azonban az így kapott eredményeim irreálisan alacsonyak lettek, ezért nem vettem őket figyelembe.

Mindezekből arra a következtetésre jutottam, hogy a szükséges tányérszám 20-22, de a biztonság kedvéért 30-as tányérszámú oszlop beszerzését ajánlom. A másik lehetőség az, hogy az üzem 15-ös tányérszámú oszlopot szerez be, és azon kétszer rektifikálja az elegyet.

## A fűrészpálma (*Serenoa repens*) kivonatok hatóanyagainak vizsgálata

Szternácsik Klaudia MSc. I. évfolyam

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

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

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

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

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

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



## Hordozós nemesfém-katalizátorok mérgeződésének és visszaforgathatóságának vizsgálata N-metilpirrol hidrogénezésében

Szöke-Molnár Kristóf MSc. I. évfolyam

Témavezető: **Dr. Hegedűs László** tudományos főmunkatárs  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A heterogén katalitikus hidrogénezési reakciók fontos szerepet játszanak a szerves vegyiparban alkalmazott redukációs eljárások között, így például a gyógyszer-, a petrokémiai, valamint a mezőgazdasági és a növényvédőszer-iparban is. A leggyakrabban használt heterogén hidrogénező katalizátorok a hordozós fém-, illetve a vázkatalizátorok. Jellemző képviselők a palládium, platina, ródium vagy a ruténium nagy fajlagos felületű hordozóra (pl. aktív szén,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SiO}_2$ ) felvitt, nagydiszperzitású formája, valamint a Raney-típusú (pl. Ni, Cu, Co) katalizátorok.

Bizonyos anyagok – például nitrogén-, foszfor-, arzén- vagy kéntartalmú vegyületek, egyes fémek (pl. Pb), illetve ionok (pl.  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ) – jelenlétében végzett redukciónál azonban jelentős aktivitáscsökkenést tapasztalhatunk az alkalmazott katalizátoroknál. Az ilyen típusú anyagok a *katalizátormérgek*. A gyógyszeriparban használt és előállított, biológiailag aktív vegyületek gyakran tartalmaznak nitrogént, kenet vagy foszfort, így az előbb említett mérgeződési jelenség megnehezítheti a heterogén katalitikus hidrogénezést. Erre megoldást jelenthet a katalizátor/szubsztrátum arány növelése, vagy a hidrogénezendő vegyületeket "védett formába" hozó segédanyagok (pl. savak) alkalmazása. Ezek azonban a nagyobb költségek, és az esetlegesen érzékeny kiindulási anyagok miatt nem mindig járható utak.

A hidrogénezések során keletkező használt katalizátorokat általában teljesen regenerálják, e nélküli ismételt felhasználásuk, különösen a gyógyszeriparban alkalmazott szigorú minőségbiztosítási szempontok (GMP) miatt, jelenleg még nem megoldott.

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén már régóta foglalkoznak katalizátorméreg jellegű vegyületek (pl. pirrolok, piridinek, nitrilek) heterogén katalitikus hidrogénezésével, valamint a redukciójuk során fellépő mérgeződési jelenségek tanulmányozásával, modellezésével.

Munkám során – bekapcsolódva a tanszéken több éve folyó kutatómunkába – azt vizsgáltam, hogy a használt hordozós nemesfém-katalizátorokat (Pd/C, Rh/C, Ru/C) regenerálás nélkül visszaforgatva, az eredeti reakcióhoz képest milyen változásokat tapasztalunk az aktivitásokban, valamint a konverziókban. Modellreakciónak az N-metilpirrol savmentes közegű hidrogénezését választottuk.

## Alkil-foszfolén ligandumokat tartalmazó komplexek előállítása, és alkalmazásuk katalitikus reakcióban

Kovács Tamara MSc. II. évfolyam

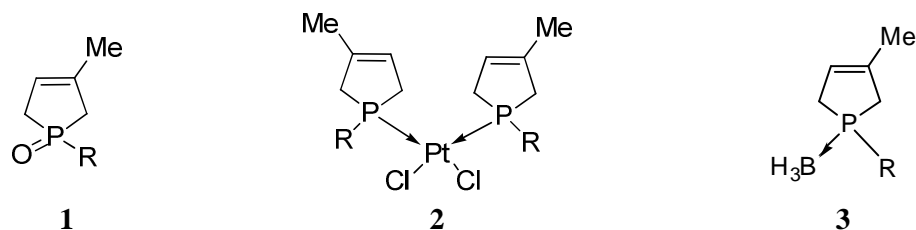
Témavezető: **Dr. Keglevich György** egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Bagi Péter** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A homogén katalitikus reakciók előtérbe kerülésével az átmenetifém-komplexekben alkalmazott foszfin-ligandumok szintézise és alkalmazása kiemelkedő kutatási területté vált. Átmenetifém-foszfin katalizátorokat többek közt a homogén fázisú hidrogénezési és hidroformilezési reakciókban alkalmaznak.<sup>1</sup> Manapság a gyógyszer- és a finomkémiai ipar révén egyre növekszik az érdeklődés az aszimmetrikus hidrogénezési és hidroformilezési reakciók iránt, így különösen fontos az optikailag aktív foszfinok és származékainak előállítása.<sup>2</sup>

A kutatócsoportban az elmúlt években eredményes eljárást dolgoztak ki az 1-szubsztituált-3-metil-3-foszfolén-1-oxidok (**1**) optikai izomerjeinek elválasztására borkősav-származékokat alkalmazva rezolválóágensként.<sup>3</sup> A gyűrűs foszfin-oxidok jelentősége többek között abban áll, hogy deoxigénezéssel a megfelelő P(III)-vegyületekké alakítva őket, katalizátorként alkalmazható átmenetifém komplexek ligandumai lehetnek.

TDK munkám során a racém és optikailag aktív 1-etil, butil-, izobutil-, izopentil-3-metil-3-foszfolén Pt- (**2**) és borán-komplexeinek (**3**) szintézisét valósítottuk meg. A megfelelő foszfolén-oxidot (**1**) először redukáltuk, majd az így kapott foszfinokat komplexképzési reakcióba vittük. Az optikailag aktív származékok esetében a megfelelő foszfolén-oxidokat rezolválással állítottuk elő a korábban kidolgozott rezolválási eljárás kiterjesztésével. A Pt-komplexeiket sztírol hidroformilezési reakciójában tesztelik katalizátorként.



R: Et(**a**), <sup>n</sup>Bu(**b**), <sup>i</sup>Bu (**c**), <sup>i</sup>Pent(**d**)

- (1) Kollár, L.; Keglevich, G. *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 4257.
- (2) Collins, A. N.; Sheldrake, G. N.; Crosby, J. *Chirality in Industry*; Wiley: Chichester, 1992.
- (3) Ujj, V.; Bagi, P.; Schindler, J.; Madarász, J.; Fogassy, E.; Keglevich, G. *Chirality* **2010**, *22*, 699.

## Diasztereomersók kristályosítása szuperkritikus antiszolvens technológiával

Lőrincz László BSc. IV. évfolyam

Témavezető: **Kózné dr. Székely Edit** egyetemi docens  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék  
Konzulens: **Bánsághi György** PhD. hallgató  
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

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

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

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

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

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

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

## **Sebgyógyulást elősegítő nanoszálal gyógyszerkészítmények fejlesztése**

**Baán Adrienn BSc. IV. évfolyam**

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi tanársegéd

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Manapság egyre nagyobb igény jelentkezik az új generációs sebfedő rendszerekre, melyek a korábbiakhoz képest számos előnnyel rendelkeznek. Ezen előnyök közé tartozik a jobb beteggyüttműködés, mely például a fájdalommentes eltávolításnak és annak köszönhető, hogy ritkábban kell őket cserélni, illetve a kedvező feltételek biztosítása a sebgyógyuláshoz, mint a megfelelő oxigén ellátás, az alacsony baktériumterhelés és a nedves környezet.

Munkám során biológiailag aktív hatóanyagot és antibakteriális hatású anyagot építettem be különböző polimer mátrixokba elektrosztatikus szálképzéssel, melyeket potenciális sebfedő rendszerekként vizsgáltam. Az antibakteriális anyag biztosítja a sebek alacsony baktériumterhelését, illetve a biológiailag aktív hatóanyag elősegíti a seb gyógyulási folyamatát. Az elektrosztatikus szálképzés során szubmikronos illetve nanoméretű szálakat lehet előállítani, amelyek a nagy felület/térfogat aránnyal rendelkeznek és változtatható a porozitásuk, ennek köszönhetően jobb és egyenletesebb, illetve kontrollált hatóanyag-leadást biztosítanak. A szisztémás adagolással szemben, mely során el kell érni egy hatásos dózist - ami akár már toxikus hatásokat is kiválthat - ebben az esetben elkerülhető a szervezet túlterhelése és helyileg adagolható a megfelelő dózis, ezáltal lecsökken a toxicitás veszélye. Hordozóként két különböző lineáris polimert, polietilén-glikolt (PEG) és polivinil-pirrolidont (PVP) alkalmaztam, melyek közül mindkettő jó szálképző tulajdonságokkal rendelkezik. Vizsgáltuk az előállított hatóanyag tartalmú nanoszálak morfológiáját, kristályosságát, hatóanyag-leadását, antibakteriális hatását.

Az elvégzett kísérletek alapján ígéretesnek bizonyultak az elkészített rendszerek mind megvalósíthatóság, mind alkalmazhatóság szempontjából. Előnyük még, hogy viszonylag könnyen méretnövelhetőek, tehát az ipar számára is alkalmazhatóak lehetnek.

## Fenoxiecetsav észterek alkalmazása a 2-benzilpropán-1,3-diol enzimkatalizált aszimmetrikus biotranszformációjában

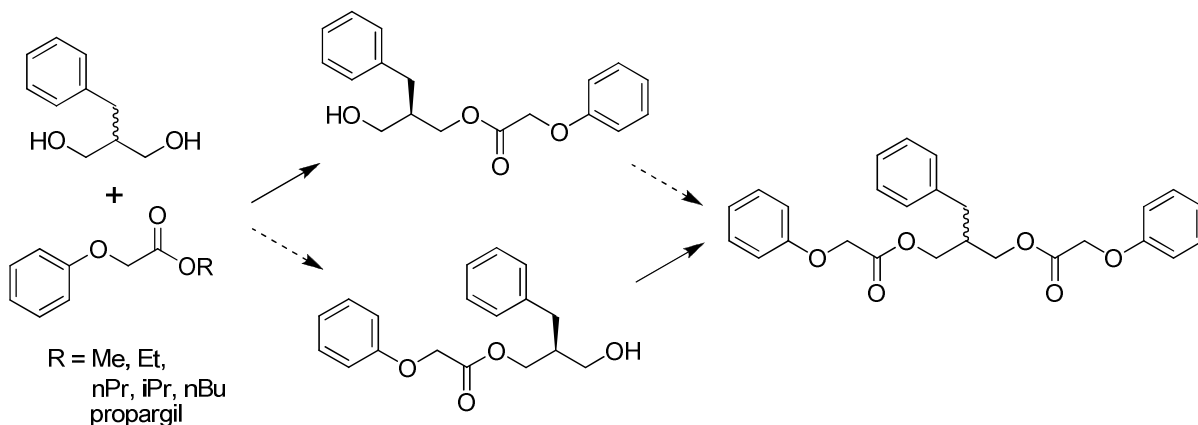
Somogyi Dániel MSc. II. évfolyam

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

Konzulens: **Boros Zoltan** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A modern kémia talán két legnagyobb kihívása az enantiomertiszta vegyületek előállítása, és a környezetbarát, mégis hatékony technológiák megvalósítása. Mindezen kihívásokra jó megoldást kínálnak az enzimekkel végrehajtott biotranszformációk, mivel magas a szubsztrátspecifitásuk, és az enzimek – fehérjék lévén – környezetbarát katalizátorok. Sokszor a kémiai módszerekkel szemben enyhébb körülmények között, kevésbé veszélyes reagensekkel képesek magas enantiomer szelektivitású reakciókra, kevesebb melléktermék keletkezése közben.

Munkám során a prokirális 2-benzilpropán-1,3-diol enzimatis acilezését vizsgáltam különböző enzimkészítményeken tesztelve a 2-fenoxiecetsav különböző észtereivel. A prokirális diolok észterezése egy ún. kinetikus amplifikáció, mely két lépésben játszódik le: a diol először monoészterre (*R* és *S*) alakul, és ezt követi a diészter képződése. A konverzióval befolyásolható az enantiomertisztaság az enzim enantiotóp szelektivitásától függően.



Munkám célja megállapítani, hogy a kereskedelemben kapható és a tanszék saját fejlesztésű enzimjei közül melyikkel állítható elő legnagyobb enantiomer szelektivitással a királis monoészter. Vizsgáltuk továbbá az észterezés során kilépő csoport (alkohol) szerepét a reagensként használt 2-fenoxiecetsav különböző alkoholokkal képzett észtereinek felhasználásával.

## Fentiazin egységet tartalmazó szenzormolekulák szintézise és anionfelismerő-képességük vizsgálata

Pál Dávid BSc. IV. évfolyam

Témavezető: **Dr. Huszthy Péter** egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

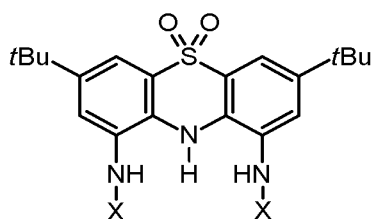
Konzulensek: **Dr. Móczár Ildikó** egyetemi tanársegéd  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**Kormos Attila** doktorjelölt  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A szupramolekuláris kémia egyik ága, az anionreceptorok kutatása az utóbbi évtizedben gyors fejlődésnek indult. A természetben is megfigyelhető molekuláris felismerés jelenségét kihasználva számos anionszelektív szenzor- és szelektormolekula alkalmas anionok érzékelésére és elválasztására.

Az anionszenzorok egy széles csoportját képviselik a semleges, viszonylag savanyú NH-csoportot tartalmazó receptormolekulák. Ezek a molekulák hidrogénkötéssel képesek anionok komplexálására, bázikus anionok esetében pedig deprotonálódásuk is megfigyelhető.

Munkám során fentiazinból kiindulva új akirális és optikailag aktív szenzormolekulákat állítottam elő. A fentiazin alkilezését, nitrálását és oxidálását követően katalitikus hidrogénezéssel jutottam az **1** diaminoszármazékhoz, majd e kulcsintermediert felhasználva karbamid, tiokarbamid és szulfonamid típusú termékeket nyertem (**2–9**).



- 1: X = H
- 2: X = fenilkarbamoil
- 3: X = fenilkarbamotioil
- 4: X = [(1S)-1-feniletíl]karbamoil
- 5: X = [(1S)-1-feniletíl]karbamotioil
- 6: X = [(1S)-1-(naft-1-il)etil]karbamoil
- 7: X = [(1S)-1-(naft-1-il)etil]karbamotioil
- 8: X = tetraacetyl-β-D-glükopiranozil-karbamotioil
- 9: X = (1S)-kámforszulfonil

A **2**, **3** és **8** anionszenzorok komplexképző tulajdonságait acetonitril oldószerben UV-látható spektroszkópiás módszerrel vizsgáltuk. Az akirális gazdamolekulák (**2** és **3**) fluorid-, klorid-, bromid-, jodid-, nitrát-, hidrogén-szulfát-, dihidrogén-foszfát- és acetáttionnal szemben mutatott viselkedésének tanulmányozása közben egyes esetekben deprotonált komplex megjelenését is igazoltuk. A **8** tetraacetylglükóz egységet tartalmazó optikailag aktív receptormolekula és *N*-védett fenilglicin tetrabutillammónium-sók kölcsönhatása esetén tanulmányoztuk a fenilglicin aminocsoportján lévő védőcsoport térkitöltésének az enantioszelektivitásra gyakorolt hatását.

## Anellált pirazolo-kinazolinok előállítása

Kovács Dániel BSc. IV. évfolyam

Témavezető: **Dr. Molnár-Tóth Judit** kutató

Servier Kutatóintézet Zrt.

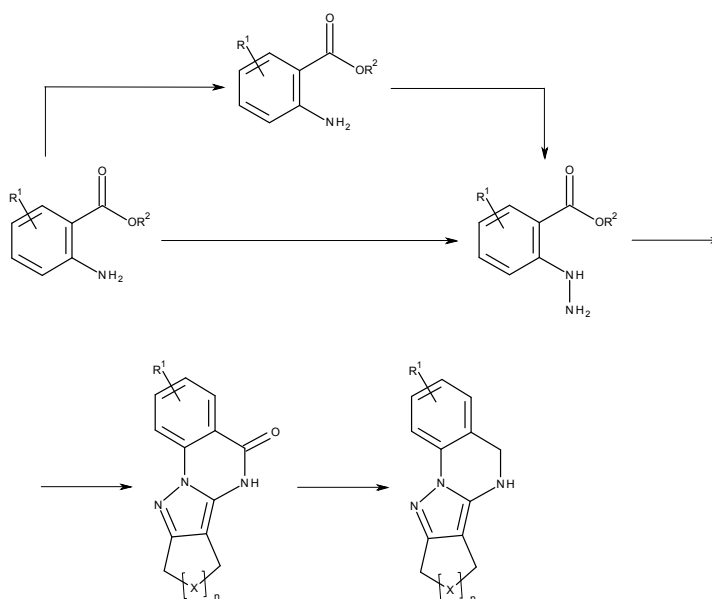
Konzulensek: **Dr. Nyerges Miklós** osztályvezető

Servier Kutatóintézet Zrt.

**Dr. Hornyánszky Gábor** egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Tudományos Diákköri Munkám során anellált pirazolo-kinazolin származékokat állítottam elő. Ezek a molekulák egy titkossági okokból meg nem nevezhető farmakológiai hatásterületen végzett HTS-ből kapott „hit” molekula analogonjai, melyeket a Servier párizsi központjában vizsgáltak. A molekulák vázszerkezete több ponton változtatható, mely diverzitását a felhasznált reagensekkel bevitt újabb szubsztituensekkel tovább növeltem.



1. ábra

A vázszerkezet 2-hidrazino-benzoésavak és  $\alpha$ -cianoketonok tandem kondenzációja során jött létre, mely redukcióját követően jutottam el a kívánt tetraciklusos vegyületekhez. A kondenzációs reakcióhoz szükséges 2-hidrazino-benzoésavakat és 2-hidrazino-benzoésav-metilészterek különböző antranilsavak diazotálásával, majd redukálásával állítottam elő.

Munkám során összesen két új 2-hidrazino-benzoésavat, három új 2-hidrazino-benzoésav- metilésztert valamint két új heterociklusos rendszert (27 db új vegyület) állítottam elő.

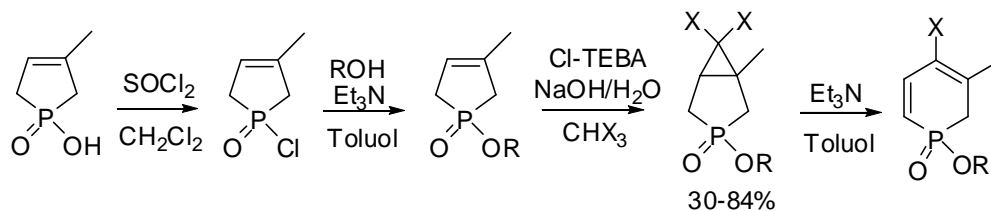
### 3-Alkoxi-6,6-dihalo-3-foszfabiciklo[3.1.0]hexán-3-oxidok szintézisének vizsgálata

Örkényi Róbert Zoltán BSc. IV. évfolyam

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

Konzulensek: **Dr. Grün Alajos** egyetemi adjunktus  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
**Kiss Nóra Zsuzsa** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Tanszéken működő kutatócsoport, már hosszú évtizedek óta foglalkozik foszforheterociklusok vizsgálatával [1,2]. Ehhez kapcsolódóan, témám új, 3-alkoxi-6,6-dihalo-3-foszfabiciklo[3.1.0]hexán-3-oxidok szintézise volt dihalokarbénezéssel, majd ezek továbbalakítása 1-alkoxi-4-halo-1,2-dihidrofoszfinin-1-oxidokká. Feladatomból volt továbbá a szükséges kiindulási anyagok, az 1-alkoxi-3-metil-3-foszfolén-1-oxidok előállítása, melyek az 1-hidroxi-3-metil-3-foszfolén-1-oxidból nyerhetők. A gyűrűs foszfinátokat fázistranszfer katalitikus körülmények között generált dihalokarbénekkal reagáltattam.



	X=Cl	X=Br
R=	- dodecil - oktil - izooktil - 3-pentil - izopentil	- dodecil - oktil

Elsősorban a lipofil láncot tartalmazó dodeciloxi-észter dihalokarbénezését vizsgáltam. A reakcióban két izomer képződik. Megfigyeltem, hogy a diklórcarbén adduktok sokkal könnyebben képződnek és stabilabbak a dibrómszármazékokhoz viszonyítva. Optimalizáltam a lúg feleslegét, illetve a fázistranszfer katalizátor mennyiségét. Az új vegyületeket  $^{31}\text{P}$ ,  $^{13}\text{C}$  és  $^1\text{H}$  NMR segítségével jellemeztem.

[1] Gy. Keglevich *Synthesis*, 10, 931–942 (1993)

[2] Gy. Keglevich in 'Topics in heterocyclic Chemistry' (Series Editor: R.R. Gupta, Volume Editor: R.K. Bansal) Springer-Verlag Berlin Hiedelberg (2009) volume 20: 'Phosphinine Derivates and their Use as Versatile intermediates in P-Heterocyclic Chemistry' p. 65-98



## Optikailag aktív potenciális tirozin kináz inhibitorok kemoenzimatikus szintézise

Csuka Pál BSc. IV. évfolyam

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

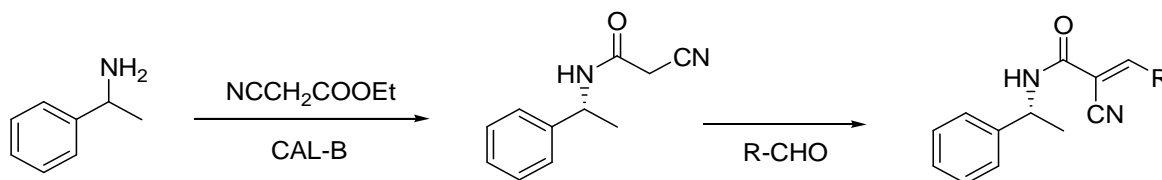
**Dr. Poppe László** egyetemi tanár  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Boros Zoltan** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A XXI. században a szerves kémia egyik legnagyobb kihívása a biológiailag aktív vegyületek gazdaságos szintézise. A gyógyszeripar mellett a műanyag-, kozmetikai- és élelmiszeriparban is rendkívül fontos az enantiomerek nagy tisztaságú előállítása, hiszen a felesleges enantiomer jelenléte akár jelentős problémákat is okozhat (Contergan). Az optikailag aktív amidok, melyek gyógyszerhatóanyagok fontos építőkövei lehetnek, egyik korszerű és környezetbarát előállítási lehetősége racém aminok enzimkatalizálta acilezése.

A tirozin kináz receptor a tumoros sejteknél több folyamatban is részt vesz, ezek a proliferáció elősegítése, az apoptózisra való hajlam lecsökkentése és új véredények kialakításának elősegítése. Ezeknél a folyamatoknál a tirozin kinázok a szabályozási kaszkád elején jelennek meg, így ha már itt inaktiváljuk vagy az aktivitását minimálisra csökkentjük a tirozin kinázok, akkor nagyban elősegíthetjük a tumor növekedésének megállítását, illetve a tumor elpusztítását.

A ciánecetsav észterekkel végzett enzimatis acilezések nagy előnye, hogy a keletkező optikailag aktív anyagok könnyen funkcionalizálhatóak, egyrészt a nitril hidrolízisével, másrészt az aktív metilén-csoport továbbépítésével. Ezt felhasználva az enzimkatalizált reakció termékéből Knoevenagel-kondenzáció segítségével nagy enantiomertisztaságú tirozin kináz inhibitorokat állítottunk elő. A reakciók jó termeléssel szolgáltatták a célvegyületeket.



Az enzimes kísérletek során vizsgáltuk a reakciókörülmények hatását az enantiomertisztaságra és a produktivitásra, valamint teszteltük a kutatócsoportban kidolgozott új enzimrögztési technikák alkalmazhatóságát is.

**Várhatóan bioaktív fenantridon alkaloid analagonok köztitermékeinek előállítása szubsztituált benzilidénacetonokból**

**Sári Éva** BSc. V. évfolyam

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

A Szerves Kémia és Technológia Tanszéken mintegy két évtizede foglalkoznak fenantridon-vázis alkaloidszármazékok szintézisével, amelyek között számos bioaktív molekula található. A vegyületcsoportra jellemző a többé-kevésbé jelentős rákellenes hatás.

BSc hallgatóként sikerült ebbe a kutatómunkába belépni és kezdeti feladatként az irodalomból ismert úton előnyösen megkapható 4-(3-alkoxi-4-hidroxi-fenil)-but-3-én-2-onokból kiindulva több lépésben fenantridon-alkaloid analagonok teljes szintézisében felhasználható köztitermékek előállítását kaptam.

Diákköri tevékenységem során a rendelkezésre álló meglehetősen rövid idő alatt a várt szintézislépéseket sikerrel elvégeztem. Az előállított köztitermékek nagyjából új, az irodalomban eddig le nem írt vegyületek, amelyek szerkezetét NMR spektroszkópiával sikerült igazolnom.

A kutatómunkát BSc szakdolgozati témaként szeretném folytatni.

## Galantamin intermedierek és származékok szintézise

Lengyel Zsófia BSc. IV. évfolyam

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**Dr. Szántay Csaba** professor emeritus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A galantamin az Amaryllidaceae alkaloidok sorába tartozik, ma már világszerte alkalmazzák a gyógyászatban, főként az Alzheimer-kór kezelésében. Több tényező is egy hatékony ipari szintézismódszer kidolgozását indokolta, így kutatócsoportunk is már több évtizede foglalkozik a galantaminnal és származékaival.

Munkám fő feladata galantamin intermedierek szintézise, reakciók optimalizálása volt. Megvizsgáltam a 7,8-dimetoxi-2-tetralon intermedier 10 lépéses szintézissorát és igyekeztem hatékonyabb megoldást találni egyes reakciókra. Munkám második része új galantamin-származékok előállítását célozta.

Az optimalizálást célzó feladataimat az alábbi pontokban tudnám összefoglalni:

- igyekeztem lecsökkenteni a reakciók lépésszámát Wittig-Horner-reakció alkalmazásával
- A Pinner-reakciót elvégeztem sósavgáz helyett kénsavval is az esetleges könnyebb kezelhetőség érdekében
- A hidrogénezést elvégeztem autoklávban, nyomás alatt is a rövidebb reakcióidő céljából
- A Dieckmann-kondenzáció mérgező, egészségre ártalmas benzol oldószerét megpróbáltam helyettesíteni más oldószerrel.

A kutatócsoportnak korábban már sikerült előállítani a nitro-galantamint, így munkám második felében céloim a nitro-csoport redukálása volt aminná. Ez az új származék a későbbiekben lehetőséget adott volna további szerkezeti részek beépítésére.

## Enantiomertiszta akridino-18-korona-6-éter szelektort tartalmazó királis állófázisok előállítása és vizsgálata

Németh Tamás MSc. I. évfolyam

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

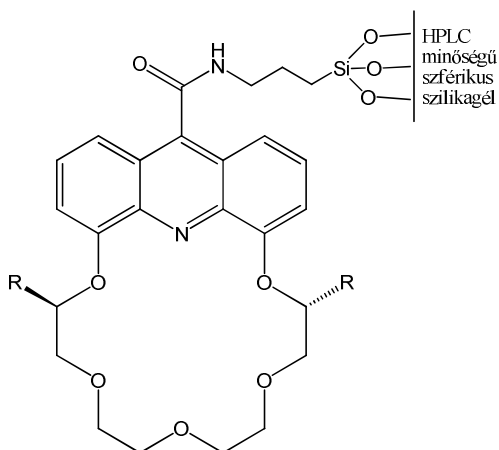
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**Dr. Tóth Tünde** egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A koronaéter alapú királis állófázisok sikeresnek bizonyultak protonált primer aminok, aminosavak és származékaik mind analitikai, mind preparatív méretű elválasztására. Feladatom a kereskedelemből könnyen beszerezhető és viszonylag olcsó alapanyagokból kiindulva akridin egységet tartalmazó, enantiomertiszta (a királis centrumain metil-, illetve izobutilcsoportot tartalmazó) királis koronaéterek szintézise és felhasználásuk vizsgálata.

TDK munkám során 2 új, akridin egységet tartalmazó enantiomertiszta koronaéter szelektormolekula alapú királis állófázist (*Ábra*), valamint ezek szintézise közben több új enantiomertiszta koronaétert állítottam elő.



Szám	R
( <i>R,R</i> )-CSP-1	Me
( <i>R,R</i> )-CSP-2	<i>i</i> Bu

*Ábra*

Az (*R,R*)-1 és (*R,R*)-2 királis állófázisokkal jó szelektivitással és hatékonyan választottuk el a különböző királis vendégmolekulák (1-NEA, 2-NEA, PEA, Br-PEA, NO<sub>2</sub>-PEA) enantiomerjeit.

A szintézisek kidolgozása során az akridin egységet tartalmazó prekursorok előállításának egyes lépéseiben módosításokat hajtottam végre a termelés javítása céljából, illetve a környezetet kevésbé terhelő, olcsóbb reagenseket használtam.

A HPLC méréseket a Richter Gedeon Nyrt-ben végezték. A kutatást az OTKA PD71910 és K81127 pályázatok támogatták.

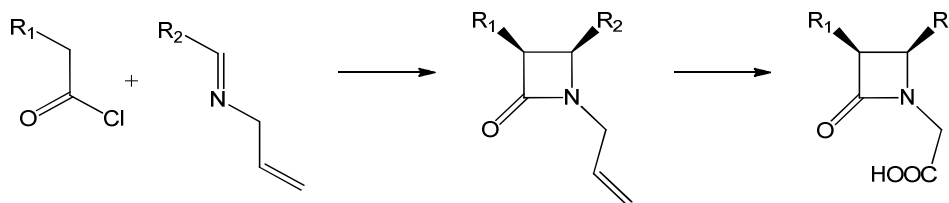
***N*-Allil- $\beta$ -laktám származékok előállítása és oxidatív transzformációja**

Szokol Bianka BSc. IV. évfolyam

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

Konzulens: **Komjáti Balázs** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A már évtizedek óta ismert antibakteriális hatású vegyületeken kívül a  $\beta$ -laktámgyűrű más biológiailag aktív vegyületek farmakofór csoportja is lehet. Kutatócsoportunk évtizedes tapasztalattal rendelkezik e vegyületcsalád előállításában. Jelenlegi kutatásunk során próbálunk az eddig alkalmazott *p*-metoxifenil-védőcsoport helyett jól használható alternatívát találni. Választásunk az allilcsoportra esett, ami nemcsak eltávolítható, hanem akár értékes funkciócsoportot tartalmazó oldallánccá is alakítható.



A kutatómunka során *Staudinger*-szintézissel, ami ketének és iminek [2+2] cikloaddíciója, számos új *N*-allil- és *N*-(*p*-metoxifenil)azetidion származék előállítására került sor. Az allilcsoport szelektív oxidációját ruténium-triklorid katalizátor segítségével sikerült megvalósítani. Ezen az úton több oxoazetidinicetsav-származékot állítottunk elő és jellemeztünk. A védőcsoport ilyen átalakítása a  $\beta$ -laktámok körében újdonságnak számít. A reakció optimalása során a szükséges katalizátor mennyiségét sikerült 0,1%-ra csökkenteni. A reakció kitűnő intermediereket szolgáltat biciklusos  $\beta$ -laktámok előállításához. Az allil- és a *p*-metoxifenil-védőcsoport használhatóságát úgy hasonlítottam össze, hogy kétféleképp védett azetidin-származékokból többlépéses szintézisben azonos termékeket állítottam elő. Az allilcsoporttal végrehajtott szintézis jobb hozammal szolgáltatta a kívánt termékeket.

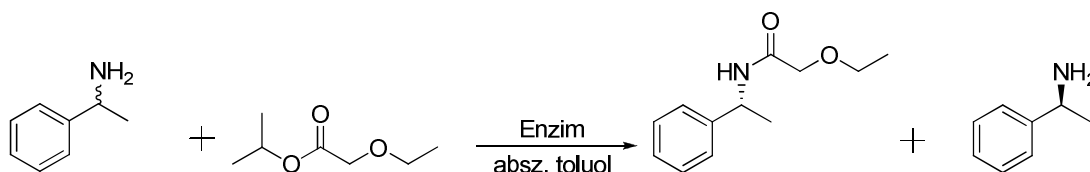
***Pseudozyma aphidis* lipáz aktivitásának vizsgálata racém aminok  
enzimkatalizált kinetikus rezolválásában**

**Oláh Márk MSc. II. évfolyam**

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

Konzulens: **Boros Zoltan** PhD. hallgató  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

TDK munkám célja a *Pseudozyma aphidis* lipáz termelőképességének vizsgálata. A különböző összetételű táptalajokon termelt lipáz(oka)t közvetlenül a fermentációs elegyekből a kutatócsoport által fejlesztett szilikagél alapú adszorbensekkel nyertem ki. A nyers készítmények összehasonlításához az (1-feniletíl)-amin enantioszelektív enzimkatalizált kinetikus rezolválását választottam, mivel a távlati cél ilyen jellegű reakciók enzimkatalizált megvalósítása szakaszos és folytonos, átfolyásos bioreaktorokban.



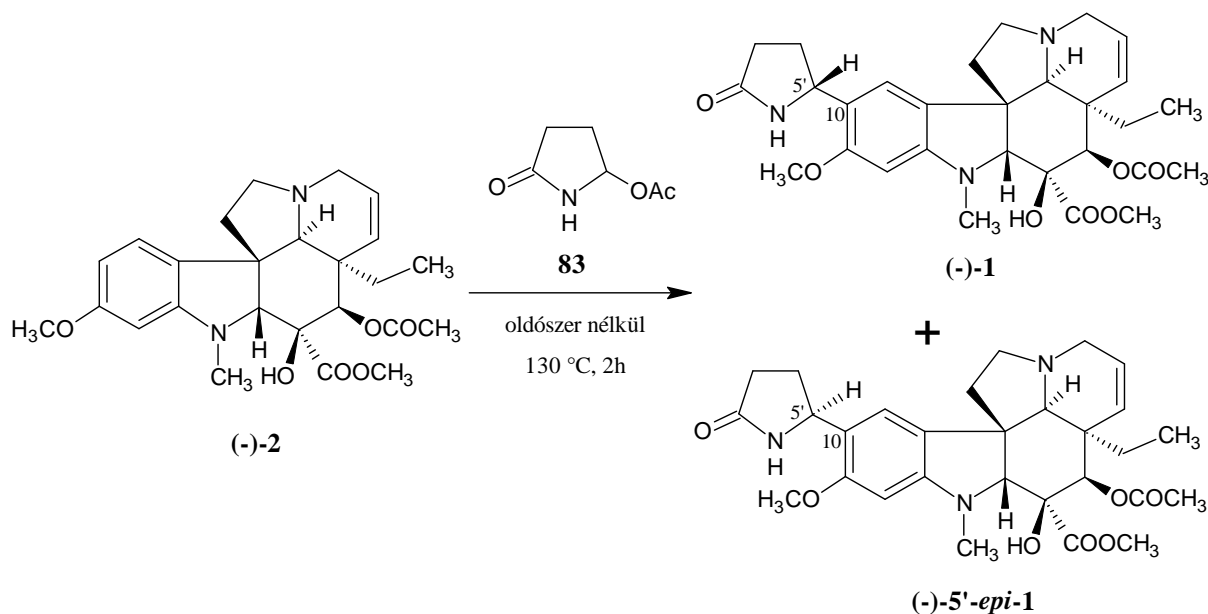
Az (1-feniletíl)-amin a legegyszerűbb aromás oldalláncú, királis amin, így modellként optimális enantioszelektív reakciók megvalósítására. Az acildonor kiválasztásához teszt sorozatokat végeztem a leghatékonyabb acilezőszer kiválasztásához. Az általánosan amin acilezésre használt etil-acetát mellett teszteltem az izopropil-acetátot, illetve előállítottam a 2-etoxiacetsavat és ennek etil- és izopropil-alkohollal képzett észtereit. A vizsgált észtereket három racém amin [(1-feniletíl)-amin, 4-fenilbután-2-amin, 1,2,3,4-tetrahidronaftalin-1-amin] különböző módon rögzített *Candida antarctica* B lipáz által katalizált kinetikus rezolválásában hasonlítottam össze. A leghatékonyabb acildonornak az izopropil-2-etoxiacetát adódott (~20-szoros aktivitásnövekedés az etil-acetáthoz képest), ezért a *Pseudozyma aphidis* lipáz enzime készítmények aktivitásának és szelektivitásának vizsgálatához ezt használtam. A kinetikus rezolválási reakciókat királis állófázisú gázkromatográfiával követtem.

## A (-)-bannucin és a (-)-5'-epibannucin első szintézise. A szén-szén kötés egyszerű kialakítása.

Ilkei Viktor MSc. III. évfolyam

Témavezető: **Dr. Kalas György** professor emeritus  
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A BME Szerves Kémia Tanszékén (ma: Szerves Kémia és Technológia Tanszék) működő Alkaloidkémiai Kutatócsoportban évtizedek óta foglalkoznak aszpidoszpermánvázás alkaloidok és rokonvegyületeik szintézisével. Ezen kutatási területhez kapcsolódik a TDK dolgozatom témája, a bannucin nevű alkaloid ((-)-**1**) első szintézisének a kidolgozása. A természetben előforduló molekulában a vindolin C-10-es helyzetéhez 2-pirrolidon egység kapcsolódik. Munkánk során megvalósítottuk a nevezett alkaloid (-)-vindolinból ((-)-**2**) kiinduló egyszerű, egy lépésben történő előállítását. Reagensként a **83**  $\alpha$ -amidokarbinol funkciót tartalmazó vegyületet választottuk, melyből az *in situ* keletkező gyűrűs *N*-acilimíniumionon keresztül lejátszódó aromás elektrofil szubsztitúció során jó termeléssel jutottunk el a célként megjelölt alkaloidhoz ((-)-**1**) és az 5'-epimerjéhez ((-)-**5'-epi-1**).



A kapott epimerkeverék komponenseit kromatográfiás módszerrel választottuk el egymástól. Az epimerok C-5'-helyzetű aszimmetriacentrumának az abszolút konfigurációját egykristály-röntgendiffrakciós mérések alapján állapítottuk meg. A tiszta diasztereomerek mért optikai forgatásának értékei alapján cáfoltuk az alkaloid izolálásáról beszámoló szerzők (**Atta-ur-Rahman** és munkatársai) eredményét, miszerint az általuk a *Catharanthus roseus*ból nyert anyag egykomponensű, epimertiszta bannucin ((-)-**1**). Vizsgáltuk továbbá a célvegyület különféle oldószerekben történő előállításának a lehetőségeit, és megállapítottuk, hogy azok az oldószermentes reakciónál alacsonyabb hozammal szolgáltatják a célterméket. Megkíséreltük a bannucinak ((-)-**1**) a (-)-vindolinból ((-)-**2**) kiinduló, más szintézisutakon történő előállítását is, ám ezen kísérletek során nem sikerült eljutnunk a célvegyülethez.

## Biodízél újszerű alkalmazása oldószermentes enzimkatalizált kinetikus rezolválásokban

Nagy-Győr László, MSc. II. évfolyam

Témavezető: **Dr. Poppe László** egyetemi tanár

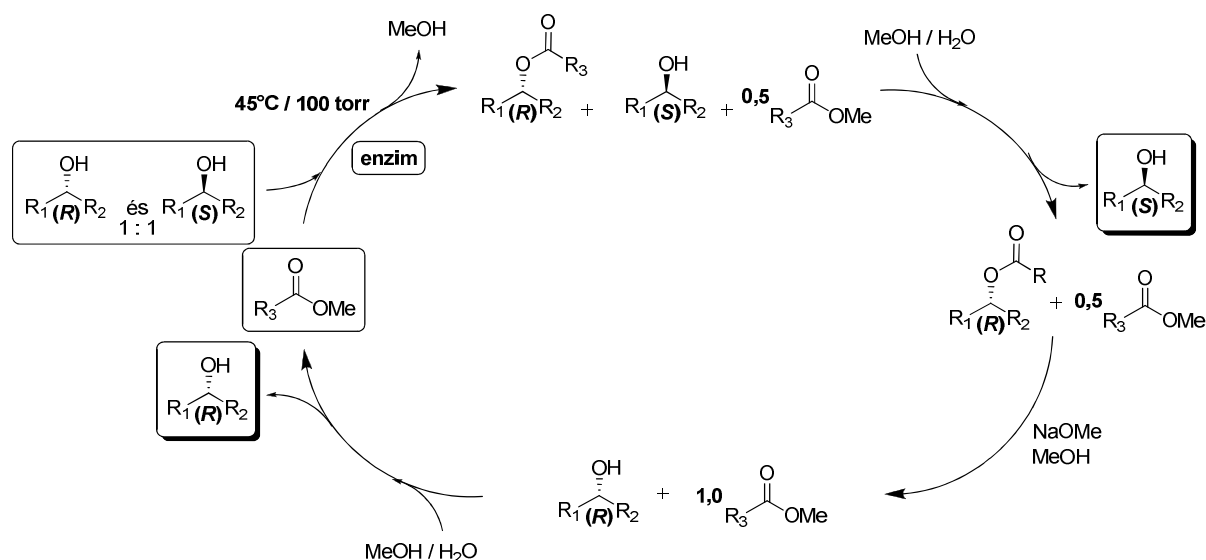
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Boros Zoltan** PhD. hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Régóta ismert és használt módszer zsírsav észterek alkalmazása enzimkatalizált kinetikus rezolválásokban. Vinil-észterek használata előnyös, mert az acilezési reakció során kilépő vinil-alkohol acetaldehidként távozik a rendszerből ezzel tolva el az egyensúlyt a terméképződés irányába. Hátrányuk azonban, hogy előállításuk nem környezetbarát, ezen felül könnyen polimerizálódnak. Metil vagy etil-észtereket alkalmazásakor számolnunk kell azzal, hogy amennyiben a kilépő alkohol nem távozik a rendszerből, visszafelé tolja el az egyensúlyt, és akár az enzimet is károsíthatja.

Munkám során a biodízelt, mint acilezőszert alkalmaztam szekunder alkoholok kinetikus rezolválásában. A reakciók megvalósítását oldószermentes közegben végeztem, a kilépő alkoholok reakcióelegyből való eltávolítását csökkentett nyomás alkalmazásával oldottam meg.



A kinetikus rezolválások során a kiindulási racém alkoholok mindkét enantiomerjét jó termeléssel nyertem ki a reakcióból, a biokatalizátorként használt enzim és a biodízél pedig kis veszteséggel, többször visszaforgatható volt. A vártakkal ellentétben az enzim aktivitása és szelektivitása a visszaforgatások során számottevően növekedett.