



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

2015

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

A szekcióülések kezdete: 2015. november 17. 8:15

Eredményhirdetés a Ch. C. 14-ben: 2015. november 17. 18:30

A BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán megrendezett 2015. évi
Tudományos Diákköri Konferenciát
a következő cégek és szervezetek támogatták:

BME Rektori Hivatal

BME VBK Dékáni Hivatal

BME Egyetemi Hallgatói Képviselőtestület

Magyar Kémikusok Egyesülete

Pro Progressio Alapítvány

Varga József Alapítvány

Richter Gedeon Nyrt.

Egis Gyógyszergyár Zrt.

Chinoin Gyógyszer és Vegyszeti Termékek Gyára Zrt.

Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közhasznú Nonprofit Kft.

Dr. Pungor Ernő családja

Nemzeti Tehetség Program

(NTP-HHTDK-15-0052 pályázat)

BME VEGY-ÉRTÉK Tehetségpont



Elnök: **Dr. Jedlovszky Pál egyetemi tanár**
Titkár: **Kelemen Zsolt PhD hallgató**
Koordinátorok: **Dr. Bódiss János tudományos munkatárs**
Dr. Berényi Szilvia tudományos munkatárs

Helye: K.I.34.

8:15 Gáber Fanni

Biológiai felületek módosítása atomi réteg leválasztással

Témavezető: Dr. Szilágyi Imre Miklós tudományos munkatárs
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék
MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

8:30 Szécsényi Andrea

Autóüvegminták elemösszetételi adatgyűjteményének létrehozása mikrokollimálású röntgenfluoreszcenciás spektroszkópiával kriminalisztikai jellegű összetevésekhez

Témavezető: Tóth Péter főtanácsos, laborvezető
Bűnügyi Szakértői és Kutatóintézet
Konzulens: Dr. Madarász János egyetemi docens
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

8:45 Hegedüs Eszter

DJ-1 fehérje oxidált variánsainak vizsgálata fordított fázisú folyadékkromatográfiás módszerrel

Témavezető: Dr. Fekete Jenő professzor emeritusz
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék
Konzulens: Dr. Bobály Balázs egyetemi adjunktus
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

9:00 Selmeci Áron

Li adszorpciója részlegesen redukált grafén-oxid felülrtén

Témavezető: Dr. Szieberth Dénes egyetemi docens
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

9:15 Ganyecz Ádám

Pontos termokémiai számítások fluorozott etilgyökökre

Témavezető: Dr. Csontos József tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

9:30 Szünet

9:45 Orbán Balázs

Szililén-komplexek szintenként való alkalmazhatóságának elméleti vizsgálata

Témavezető: Szilvási Tibor egyetemi tanársegéd
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:00 Horváth Klaudia

Szilícium-karbid nanoklaszterek fotostabilitásának vizsgálata

Témavezető: Dr. Gali Ádám egyetemi docens
Wigner FK SZFI

BME TTK Atomfizika tanszék

Konzulens: Beke Dávid tudományos segédmunkatárs

Wigner FK SZFI

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi tanszék

10:15 Szakolczai Anett

Gyenge savak és gyenge bázisok kölcsönhatása nemvizes közegben

Témavezető: Dorkó Zsanett PhD hallgató

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: Dr. Horvai György egyetemi tanár

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:30 Kováts Benjámín

Szolvatációs modellek vizsgálata pontos elméleti pK_a számításokhoz

Témavezető: Dr. Nagy József egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: Komjáti Balázs PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:45 Barabás Júlia

Aranyklaszterrel érzékenyített titán-dioxid bevonat: A jövő napeleme?

Témavezető: Dr. Höltzl Tibor fejlesztőmérnök

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulensek: Dr. Veszprémi Tamás professzor emeritusz

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Tegze Borbála PhD hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

11:00 Szünet

11:15 Fónagy Péter

Fotoaktív szol-gél bevonatok előállítása és jellemzése

Témavezető: Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: Tegze Borbála PhD hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

11:30 Faragó Endre Zoltán

A legkisebb nanokarika - cikloparafenilének stabilitásának kvantumkémiai vizsgálata

Témavezető: Szilvási Tibor egyetemi tanársegéd
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

11:45 Maszler Péter

N,N-Dimetilanilin β -deutérium izotópeffektusának mechanisztikus vizsgálata fordított fázisú folyadékkromatográfiával

Témavezetők: Dr. Könczöl Árpád kutató-fejlesztő
Richter Gedeon Nyrt.
Dr. Kupai József MTA posztdoktor
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulensek: Dr. Balogh György Tibor c. egyetemi docens
Richter Gedeon Nyrt.
Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

12:00 Schall Eszter

Kísérleti élelmiszermátrixok kialakítása és alkalmazása a gluténtartalom meghatározására alkalmas analitikai módszerek fejlesztésében

Témavezető: Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék
Konzulensek: Kormosné Dr. Bugyi Zsuzsanna egyetemi tanársegéd
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék
Hajas Livia tanszéki mérnök
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

12:15 Zódi Levente Zsolt

$R_2B-PR'_2$ foszfinoboránok reverzibilis hidrogénaddíciójának kvantumkémiai vizsgálata

Témavezető: Dr. Szieberth Dénes egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

ANYAGTUDOMÁNY ÉS POLIMEREK SEKCIÓ

Elnök: **Dr. Kubinyi Miklós** egyetemi tanár
Titkár: **Kirschweng Balázs** PhD hallgató
Koordinátorok: **Dr. Keszthelyi Tamás** tudományos főmunkatárs
Dr. Nagy Zsombor egyetemi adjunktus

Helye: K.mf. 34.

8:15 Barbély Gréta

Szimultán termo-optikai mikroszkópia és kalorimetriai módszer kidolgozása

Témavezető: Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

8:30 Sós László

Redukált grafén-oxid tartalmú hidrogélek

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

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

8:45 Várdai Róbert

Szálerősítésű hibrid kompozitok: szerkezet és ütésállóság

Témavezető: Dr. Renner Károly tudományos főmunkatárs
MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport

9:00 Juhász Viktória Judit

Új mágneses nanobiokatalizátorok

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

Konzulens: Weiser Diána doktorjelölt
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:15 Sárközi Márk

Halloysite nanorészecskéken adszorbeált kvercetin stabilizáló hatékonysága polietilénben. Feltételezések és valóság.

Témavezető: Dr. Földes Enikő címzetes egyetemi tanár
MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport

Konzulens: Hári József PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

9:30 Szünet

9:45 Molnár János

Az izotaktikus polipropilén optikai tulajdonságait befolyásoló szerkezeti tényezők felderítése

Témavezető: Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulensek: Sepsi Örs tudományos segédmunkatárs
BME Atomfizika Tanszék
Ujhelyi Ferenc tudományos segédmunkatárs, laborvezető
BME Atomfizika Tanszék

10:00 Justh Nóra

Fotokatalitikus grafén-oxid(GO) nanokompozitok előállítás

Témavezető: Dr. Szilágyi Imre Miklós tudományos munkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

10:15 Mezei Gábor

Lignin diszpergálhatóságának javítása polietilénben a stabilizáló hatás növelésére

Témavezető: Dr. Földes Enikő címzetes egyetemi tanár
MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport
Konzulens: Kun Dávid PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

10:30 Barczikai Dóra

Reverzibilisen duzzadó redox érzékeny poli(aszparaginsav) hidrogélek

Témavezető: Dr. Szilágyi András egyetemi docens
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: Molnárné Krisch Enikő PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

10:45 Bartos András

Elasztomerrel módosított PP/szizál kompozitok ütésállósága

Témavezető: Dr. Móczó János tudományos főmunkatárs
MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport

11:00 Szünet

11:15 Balázs Csaba

Domináns kölcsönhatások felderítése rétegszilikát nanokompozitokban

Témavezető: Dr. Pukánszky Béla egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: Hegyesi Nóra tudományos segédmunkatárs
MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

11:30 Kéri Orsolya

Fotokatalitikus mag-héj nanokompozitok

Témavezető: Dr. Szilágyi Imre Miklós tudományos munkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

11:45 Gombár Tibor

Nyíltláncú telített dikarbonsav homológok diciklohexil származékainak göcképző hatása izotaktikus polipropilénben

Témavezető: Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

12:00 Klimkó Júlia Luca

Poli(aszparaginsav)-szilika kompozitok fejlesztése enzimek hatékony rögzítésére

Témavezetők: Dr. Poppe László egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Szilágyi András egyetemi docens
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulensek: Molnárné Krisch Enikő PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Weiser Diána doktorjelölt
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

12:15 Csoknyay Tamás

Biodegradálható polimer keverékek

Témavezető: Dr. Vargha Viktória ny. tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Elnök: **Dr. Salgó András egyetemi tanár**
Titkár: **Horváth Anna PhD hallgató**
Koordinátorok: **Dr. Barta Zsolt egyetemi adjunktus**
Dr. Tardy Gábor Márk egyetemi adjunktus
Dr. Wunderlich Livius egyetemi adjunktus

Helye: Ch. 205.

8:15 Bacsárdi Szilvia, Máté Rózsa

Innovatív talajjavítás bioszénnel - laboratóriumtól a szabadföldi alkalmazásig

Témavezetők: Dr. Molnár Mónika egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék
Dr. Feigl Viktória egyetemi tanársegéd
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék
Konzulensek: Dr. Rékási Márk osztályvezető
MTA ATK TAKI Agrokémiai és Növénytaplálási Osztály
Farkas Éva PhD hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

8:30 Bertalan Éva Ágnes

Uracil-DNS genommal rendelkező bakteriofág túlélési stratégiájának vizsgálata

Témavezető: Dr. Vértessy G. Beáta tanszékvezető egyetemi tanár
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék
MTA TTK Enzimológiai Intézet
Konzulens: Nagy Kinga PhD hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

8:45 Supala Eszter

A mezo-tetrakisz(4-N-metilpiridil)porfirin hatása a DNS-molekula szerkezeti és nanomechanikai tulajdonságaira

Témavezető: Dr. Kellermayer Miklós egyetemi tanár
SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet
Konzulens: Dr. Sveiczter Ákos egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

9:00 Babos Kitti

Autofágiát indukáló hatóanyagok életképesség-növelő hatásának vizsgálata celluláris stressz esetén

Témavezetők: Dr. Kapuy Orsolya egyetemi adjunktus
SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet
Zámbó Veronika PhD hallgató
SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet
Konzulens: Dr. Szarka András habilitált egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

BIOKÉMIA ÉS BIOTECHNOLÓGIA SZEKCIÓ

9:15 Székely Virág

Új fluoreszcens esszé kidolgozása a gyógyszer farmakológiában fontos humán Organikus Anion Transzporter Polipeptidek aktivitásának vizsgálatára

Témavezető: Dr. Laczka Csilla tudományos munkatárs
MTA TTK Enzimológiai Intézet, Membránfehérje Kutatócsoport

Konzulens: Patik Izabel PhD hallgató
MTA TTK Enzimológiai Intézet, Membránfehérje Kutatócsoport

9:30 Szünet

9:45 Császár Eszter

A Syk kináz szerepe a cerebrális iszkémia során kialakuló gyulladásos folyamatokban

Témavezető: Dr. Dénes Ádám tudományos főmunkatárs
MTA KOKI Neuroimmunológia kutatócsoport

Konzulens: Dr. Szarka András habilitált egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

10:00 Rubics András

Tau aggregációt gátló kismolekulájú vegyületek tesztelése *Drosophila melanogaster* neurodegeneratív betegség modelleken

Témavezető: Dr. Kárpáti Manuella egyetemi tanársegéd
MTA-TTK Neurodegeneratív Betegségek Gyógyszerkutató Csoport

10:15 Holczer Marianna

A Gadd34 fehérje és az mTOR útvonal kapcsolatának vizsgálata endoplazmás retikulum stressz esetén

Témavezető: Dr. Kapuy Orsolya egyetemi adjunktus
SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet

Konzulens: Dr. Szarka András habilitált egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

10:30 Pölöskei István

A dUTPáz és az Stl inhibitor fehérje kölcsönhatásának összehasonlító vizsgálata eukarióta és prokarióta enzimmodellen

Témavezetők: Dr. Vértessy G. Beáta tanszékvezető egyetemi tanár
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék
MTA TTK Enzimológiai Intézet
Benedek András PhD hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

10:45 Percze Krisztina

Vírusdetektálás aptamerekkel

Témavezető: Dr. Mészáros Tamás egyetemi docens
SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet

Konzulens: Dr. Szarka András habilitált egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

11:00 Szünet

11:15 Márton Margita Ágnes

A PERK célgének szerepének átfogó vizsgálata endoplazmás retikulum stressz esetén

Témavezető: Dr. Kapuy Orsolya egyetemi adjunktus
SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet

Konzulens: Dr. Szarka András habilitált egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

11:30 Harkai Ákos

Aptamer szelekció *in vitro* transzlált humán miokardiális prohormonra

Témavezető: Dr. Mészáros Tamás egyetemi docens
SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet

Konzulens: Dr. Sveiczler Ákos egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

11:45 Matejka Judit

Kölcsönható szerkezeti elemek és kölcsönhatási felszín azonosítása egy fehérje-fehérje interakción alapuló molekuláris kapcsoló esetén

Témavezető: Dr. Vértessy G. Beáta tanszékvezető egyetemi tanár
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék
MTA TTK Enzimológiai Intézet

Konzulens: Nyíri Kinga tudományos segédmunkatárs
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

12:00 Tisza Anna

Antiangiogén tirozinkináz-inhibitorok hatásának vizsgálata egér colon tumor modelleken

Témavezető: Török Szilvia kutató biológus
Országos Korányi Tbc és Pulmonológiai Intézet

Konzulens: Dr. Szarka András habilitált egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

12:15 Hári Máté Ferenc, Nagy Eszter

Rejtett hibák és bizonytalanságok feltárása az eleveniszapos foszfor eltávolítási hatékonyság meghatározásában

Témavezető: Bakos Vince egyetemi tanársegéd
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

KÉMIAI TECHNOLÓGIA SEKCIÓ

Elnök: **Dr. Tungler Antal professzor emeritusz**
Titkár: **Hergert Tamás PhD hallgató**
Koordinátorok: **Angyalné dr. Kocka Katalin egyetemi adjunktus**
Dr. Kádas István c. egyetemi docens

Helye: Ch. A. 20.

8:15 Farkas Balázs

Olvadék szálfűvás gyógyszer technológiai alkalmazása

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

Konzulens: Balogh Attila doktorjelölt
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:30 Tarjáni Ariella Janka

Desztillációs technológiák vizsgálata szénhidrogén elegy példáján

Témavezető: Farkasné Szőke-kis Anita PhD hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

8:45 Baranyi Bernadett

Önszerveződő nanohordozós organokatalizátorok újfajta előállítás és alkalmazása aszimmetrikus reakciókban

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

Konzulensek: Sóti Péter Lajos doktorjelölt
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
LAVET Gyógyszergyártó Kft.
Dr. Nobuyuki Mase egyetemi tanár
Shizuoka Egyetem, Alkalmazott Kémia és Biomérnöki Tanszék (Japán)

9:00 Dargó Gergő

Gyógyszermolekula-ciklodextrin komplexek vizsgálata automatizált analitikai módszerek segítségével

Témavezető: Dr. Balogh György Tibor osztályvezető, címzetes egyetemi docens
Richter Gedeon Nyrt. Szintézistámogató Laboratórium
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

KÉMIAI TECHNOLÓGIA SZEKCIÓ

9:15 Dévényi Dániel

Alkaloid koncentráció szabályozása macskakarom (*Uncaria Tomentosa* [Willd.] DC) kivonatokban hagyományos kevertetéses extrakcióval

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

Konzulens: Calvo García Alba PhD hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

9:30 Szünet

9:45 Le Ba Thong

Hordozós ródiumkatalizátorok mérgeződésének és visszaforgathatóságának vizsgálata pirrolok hidrogénezésében

Témavezető: Dr. Hegedűs László tudományos főmunkatárs
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:00 Varga Bence

Etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxid rezolválása TADDOL- és borkősav-számazékokkal

Témavezetők: Dr. Bagi Péter posztdoktor
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Fridrich Bálint

Optikailag aktív gamma-valerolakton stabilitás vizsgálata és alkalmazása

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

Konzulens: Tukacs József Márk egyetemi tanársegéd
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

10:30 Kőrösi Márton

4-Klórmandulasav rezolválása gáz antiszolvens kristályosítási technika alkalmazásával

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

Konzulens: Zodge Amit PhD hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

KÉMIAI TECHNOLÓGIA SEKCIÓ

10:45 **Ádám Anna**

>P(O)H reagensek addíciója iminekre mikrohullámú körülmények között

Témavezetők: Dr. Bálint Erika tudományos munkatárs
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport
Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: Tajti Ádám PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:00 **Szünet**

11:15 **Bencsik Dániel**

Fixfilmes szennyvíztechnológia üvegházhatású gázkibocsátásának becslése

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

11:30 **Lakó Ágnes**

Karbamidzármarékok újszerű szintézise áramlásos reaktorban

Témavezető: Dr. Greiner István kutatási igazgató
Richter Gedeon Nyrt.

Konzulensek: Bana Péter PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Kiss Nóra Zsuzsa egyetemi tanársegéd
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:45 **Bugyi Orsolya**

Poli(etilén-tereftalát) hulladék kémiai újrahasznosítása és az új, értéknövelt termékek jellemzése

Témavezető: Dr. Vargha Viktória ny. tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ

Elnök: **Dr. Fogassy Elemér professzor emeritusz**
Titkár: **Kókai Eszter PhD hallgató**
Koordinátorok: **Dr. habil. Hell Zoltán egyetemi docens**
Dr. Móczár Ildikó egyetemi adjunktus

Helye: Ch. C.14.

8:15 Molnár Dániel

α,β -Telítetlen észterek boránkatalizált hidroszililezése

Témavezetők: Fegyverneki Dániel tudományos segédmunkatárs
MTA TTK Organokatalízis Kutatócsoport
Dr. Soós Tibor megbízott intézetigazgató, tudományos főmunkatárs
MTA TTK Organokatalízis Kutatócsoport
Konzulens: Dr. Hornyánszky Gábor egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:30 Pápai Réka

Várhatóan daganatellenes hatású dimer alkaloidok szintézise

Témavezető: Dr. Hazai László egyetemi magántanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: Dr. Keglevich Péter egyetemi tanársegéd
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:45 Herbay Réka

P-Heterociklusos foszfin-boránok és optikailag aktív foszfin-oxidok előállítása foszfóniumsó intermedieren keresztül

Témavezetők: Dr. Bagi Péter posztdoktor
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:00 Vámosi Péter

Kísérletek a prolinalin A és B szintézisére

Témavezető: Dr. Hazai László egyetemi magántanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: Ilkei Viktor PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:15 Németh Orsolya

A foszforos sav szerepe dronátok szintézisében

Témavezetők: Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Grün Alajos egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: Nagy Dávid Illés PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:30 Szünet

SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ

9:45 Nemcsok Tamás

Királis koronaéterek szintézise és alkalmazása enantioszelektív katalizátorként

Témavezetők: Dr. Bakó Péter egyetemi magántanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Rapi Zsolt tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:00 Suba Szandra

Enzimek kovalens rögzítésére alkalmas szilikagél alapú hordozók fejlesztése biokatalitikus célokra

Témavezető: Dr. Poppe László egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: Oláh Márk PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Janzsó-Berend Péter Zoltán

Új típusú fluoreszcens nukleotidszenzorok szintézise és spektroszkópiai vizsgálata

Témavezető: Dr. Bitter István ny. egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: Bojtár Márton Gáspár PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:30 Németh András

Regioszelektivitás vizsgálata acetofenon-ketálok metallálási reakcióiban

Témavezetők: Nyulasi Bálint hatóanyag eljárásfejlesztési laborvezető
Egis Gyógyszergyár Zrt.
Dr. Kupai József MTA posztdoktor
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:45 Szentjóni Hajnalka

Új diarilfoszfinsav egységet tartalmazó koronaéterek szintézise és a szubsztituensek hatásának vizsgálata a savi disszociációs állandókra

Témavezetők: Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Tóth Tünde egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulensek: Dr. Balogh György Tibor osztályvezető, címzetes egyetemi docens
Richter Gedeon Nyrt. Szintézistámogató Laboratórium
Szabó Tamás PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:00 Szünet

SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ

11:15 Tóth Regina Eszter

Alkil-fenil-*H*-foszfinátok előállítása és felhasználása foszfa-Mannich-reakciókban

Témavezetők: Dr. Bálint Erika tudományos munkatárs
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport
Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:30 Varga Bálint

1-Fenilpirrol összekötőelemet tartalmazó, DSSC típusú napelemben alkalmazható szerves festék előállításának tanulmányozása

Témavezetők: Dr. Faigl Ferenc egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Mátravölgyi Béla tudományos munkatárs
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport
Konzulens: Hergert Tamás PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:45 Elek Gábor Zoltán

„A Breslow-intermedier nyomában”

Témavezető: Kelemen Zsolt tudományos segédmunkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Konzulens: Dr. Nyulászi László egyetemi tanár
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

12:00 Szabó Zita

Optikailag aktív [1,1'-bifenil-2-il]-1*H*-pirrol származékok előállítása

Témavezető: Dr. Faigl Ferenc egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: Dr. Thurner Angelika tudományos főmunkatárs
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport

12:15 Tripolszky Anna

α -Aminofoszfin-oxidok szintézise és P-ligandumként történő felhasználása

Témavezetők: Dr. Bálint Erika tudományos munkatárs
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport
Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

**A DOLGOZATOK
ÖSSZEFOGLALÓI**

Biológiai felületek módosítása atomi réteg leválasztással

Gáber Fanni, MSc III. évf.

Témavezető: **Dr. Szilágyi Imre Miklós** tudományos munkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

Biológiai felületek szerkezete a nanotechnológia számára fontos kiindulópont lehet, mivel a biomimetika segítségével lehetőségünk van a már amúgy is jól működő mechanizmusok további finomítására pl. a textilipar és az autóipar számára, vagy akár új termékek előállítására.

Munkám során madártollak felületét vizsgáltam annak felderítése céljából, hogy egyes egyedeknél a felületi szerkezet is befolyásolja-e a szerkezeti szín kialakulását. Az irodalom ez idáig csak a belső szerkezetet nevezte meg fő kiváltó okként madártollak esetén. Számos madártollat gyűjtöttem össze a vizsgálatokhoz, főként kék és zöld színű tollakat, mivel ezeket a színeket okozhatják a természetben rendezett struktúrák, és nem csak pigmentek.

A mintákat először pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) vizsgáltam, és szabályos szerkezeteket kerestem, amik szerkezeti színek kialakulására utalhatnak. A műszer segítségével sikerült 3 tollat kiválasztani (ara, páva és szajkó), melyeken további elemzéseket végeztem. Ezek közül a szajkó és az ara tolla tartalmazott kék színt, így ezeknél volt esély felületi szerkezeti színek kimutatására. A pávatoll barna színű volt, színét csak pigmentáció okozta, emiatt referenciaként alkalmaztam.

A tollak optikai tulajdonságait UV-VIS spektrofotométerrel vizsgáltam, és reflexiós spektrumokat készítettem. Ezt követően atomi réteg leválasztással (ALD) módosítottam a tollak felületét amiatt, hogy az esetleges felületi szerkezeteket a filmréteg elfedje, és így megváltozzanak a tollak optikai tulajdonságai. A tollakat 50 és 150 nm Al_2O_3 filmmel vontam be $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ és víz prekursorokat használva. Fontos megjegyezni, hogy a tollak hőérzékenysége miatt a reakció során alacsony hőmérsékletet (100 °C) alkalmaztunk. A tollak bomlását termikus analízissel (TG-DTA) ellenőriztük, amely során megbizonyosodtunk róla, hogy 100 °C-on a tollak még nem kezdenek el bomlani. A kérdésünkre a választ indirekt módon kerestük, ezért újra spektrofotometriás vizsgálatoknak vettem alá az Al_2O_3 ALD filmmel bevont tollakat. Továbbá pásztázó és transzmissziós elektronmikroszkóppal és elektronsugaras mikroanalízissel (SEM-EDX, TEM) próbáltam kimutatni az Al_2O_3 filmréteg jelenlétét a felületen, valamint tanulmányozni a módosított felületek morfológiáját. A SEM képeken a szajkó és az aratoll esetében látható viszonylag szabályosabb szerkezet, a pávatollnál nem. Ez alátámasztja, hogy a pávatoll barna színének kialakításáért csak a pigmentek felelősek. Az ALD reakciót követően az UV-Vis spektrumok csak a szajkótollnál változtak meg jelentősen, a másik két tollnál nem. Így csak a szajkó tollnál volt sejthető szerkezeti színt okozó felületi nanostruktúra jelenléte. A szajkótollról készített nagyobb felbontású SEM felvételeken szabályos, faerezethez hasonló szerkezet látható. A kiemelkedő dombok kb. 150 nm szélesek voltak, a közöttük lévő völgyek mélysége kb. 180 nm, míg szélessége kb. 250 nm volt. Ezt követően TEM felvételekkel is kimutattuk az egyenes ALD filmet a szajkó tollon, valamint azt, hogy 100 °C-on nem károsodott a toll belső struktúrája, és nem ez okozta a szajkó esetén az UV-Vis spektrum megváltozását. Összefoglalva, eredményeim alapján a szajkótoll kék színét a felületi szerkezet jelentős mértékben befolyásolja, és így ez az első példa arra, hogy madártollakon a szerkezeti színt nem csupán a felszín alatti rendezett struktúrák, hanem felületi nanoszerkezetek alakítják ki.

**Autóüvegminták elemösszetételi adatgyűjteményének létrehozása
mikrokollimálású röntgenfluoreszcenciás spektroszkópiával
kriminalisztikai jellegű összevetésekhez**

Szécsényi Andrea, BSc IV. évf.

Témavezető: **Tóth Péter** főtanácsos, laborvezető
Bűnügyi Szakértői és Kutatóintézet

Konzulens: **Dr. Madarász János** egyetemi docens
BME, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az elmúlt időszakban lehetőséget kaptam, hogy betekintést nyerjek és részt is vegyek egy újfajta üvegvizsgálati módszer kidolgozásában a Bűnügyi Szakértői és Kutatóintézetben. Az üvegvizsgálatok elsődleges célja bizonyítani, hogy a talált üveg (például autófeltörés gyanúsítottjánál, cserbenhagyásos gázolás helyszínén) és az összehasonlító minta (például feltört autóból vagy a gázolás gyanúsítottjának autójából származó üvegek) származhatnak-e azonos forrásból. Ugyan a Kutatóintézet rendelkezik már egy ilyen vizsgálatokra alkalmas optikai vizsgálati módszerrel, de beszerzett újonnan egy mikrokollimálású röntgenfluoreszcenciás spektroszkópot (μ XRF), amely szintén alkalmas lehet – elemösszetételi elemzés alapján – az eltérő forrásból származó üvegminták megkülönböztetésére, kiegészítve a már meglévő vizsgálati módszer szolgáltatott eredményeket, esetleg némileg fel is váltva azt. Az elsődleges feladatomból és célomból egy olyan vizsgálatosorozat megkezdése és végrehajtása volt, amely segíthet eldönteni, hogy a beépített alapparamétereken alapuló μ XRF spektroszkóppal történő standardless mérések alkalmasak lehetnek-e összehasonlító vizsgálatokra.

Vizsgálataimhoz egy 253 db-os, autóüveg-törmeléből álló, dokumentált mintasorozatot kaptam. Minden mintát 5 ponton lemértem az energiadiszipatív detektorral ellátott μ XRF mérőberendezéssel. A mérési eredményekből egy olyan adatgyűjteményt hoztam létre, amely az egyes üvegminták mennyiségi összetételét tartalmazza atomszázalékban kifejezve, táblázatosan. Az adatok további feldolgozásaként az egyes minták megfelelő elemi adatsorainak varianciáját és várható értékét hasonlítottam össze F-, majd kétmintás t-próbát végezve. Azt vizsgáltam, hogy az egyes minták összetételi értékei páronként 5%-os szignifikancia szint mellett megkülönböztethetőek-e, illetve kijelenthető-e ilyen szignifikancia szint mellett, hogy különböző forrásból származnak.

A statisztikai próbák elvégzéséhez MATLAB fejlesztő környezetében egy segédprogramot készítettem. Kidolgoztam egy mérési stratégiát arra nézve, hogy az összehasonlítást mely elemek alapján érdemes elvégezni, figyelembe véve az üvegek általános összetételét, a készülék előnyeit és korlátait (pl.: spektrális felbontás, spektrális zavarás), valamint a releváns szakirodalomban megjelent eredményeket. Az így kiválasztott összetételi arányok: Ca/Fe, Ca/K, Ca/Si és Sr/Zr lettek. Az előzetes eredmények igen biztatóak, ugyanis a négy arány vizsgálatával a minták 88,9%-a megkülönböztethető.

DJ-1 fehérje oxidált variánsainak vizsgálata fordított fázisú folyadékkromatográfiás módszerrel

Hegedüs Eszter, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Fekete Jenő** professor emeritus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Dr. Bobály Balázs** egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A DJ-1 fehérje az emberi szervezet szinte minden sejtjében expresszálódik. Fontos szerepet tölt be az oxidatív stressz elleni védelemben, ebből következően az oxidatív stressz által okozott neurodegeneratív betegségekkel szembeni küzdelemben is. Napjainkban közel 10 millió ember szenved Parkinson-kórban, melynek minél korábbi diagnosztizálása, esetleges gyógyítása az orvostudomány egyik égető kérdése. A DJ-1 fehérje vizsgálata ezért kiemelkedően fontos, mivel oxidációjának mértéke összefüggésbe hozható ilyen jellegű betegségek kialakulásával, kulcs szerepet tölthet be a diagnosztizálásban és a gyógyszerjelölt molekulák vizsgálatában is. Vizsgálataink céljaul ezért elsősorban a DJ-1 fehérje oxidált variánsainak részletes vizsgálatát tűztük ki.

Munkánk során fordított fázisú folyadékkromatográfiás módszert fejlesztettünk ki a fehérje oxidált variánsainak elválasztására. Megvizsgáltuk a DJ-1 fehérje viselkedését oxidatív körülmények között, az agyban lezajló oxidatív folyamatok modellezésére. H_2O_2 -vel kezeltük a mintákat, és vizsgáltuk az oxidációs folyamatok hatását. A kifejlesztett kromatográfiás módszert tömegspektrometria-kompatibilis módszerré dolgoztuk át, hogy az oxidált variánsokról tömeginformációt is kaphassunk. Ennek során kiváltottuk azt a mozgófázis additívet, mely az MS érzékenységet rontaná. Kromatográfiás méréseink során egymástól jól elváló csúcsokat tapasztaltunk, így elmondható, hogy az általunk használt módszer alkalmas a DJ-1 fehérje különböző oxidációs állapotainak elválasztására, a módszer érzékeny tömegspektrometriás detektálást tesz lehetővé. A folyadékkromatográfiás mérések mellett elvégeztünk kifelbontású tömegspektrometriás méréseket is, melyek során valószínűsíthetjük, hogy a folyadékkromatográfiás csúcsok valóban különböző mértékben oxidált fehérje variánsok.

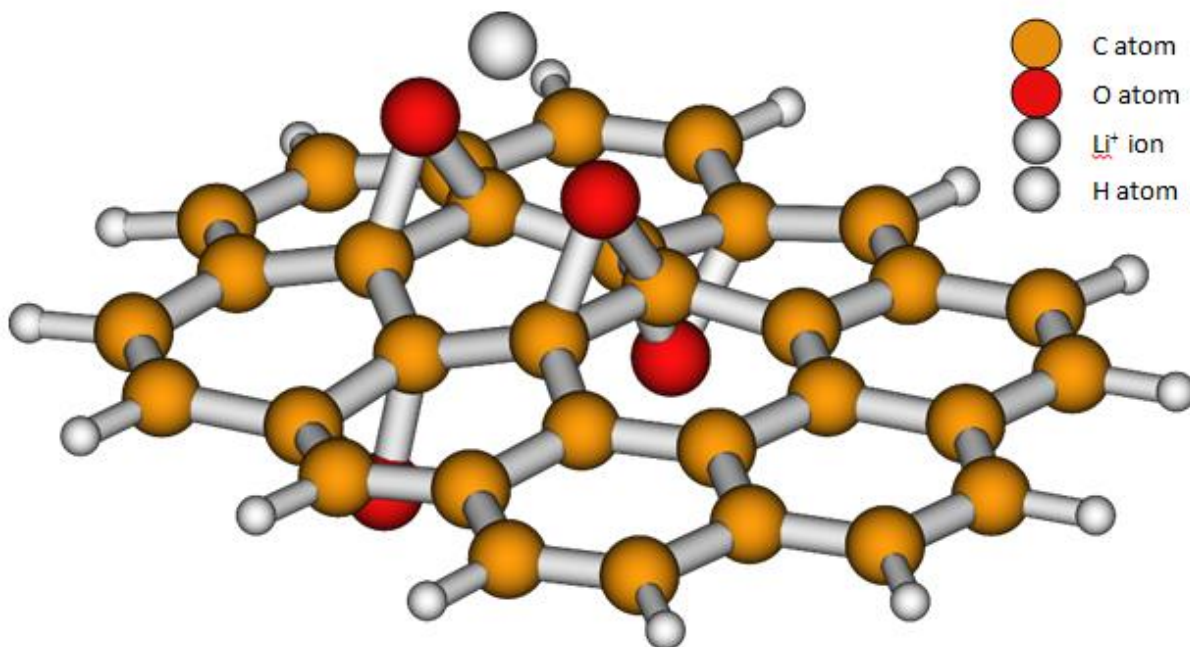
Partnerünk a módszer segítségével gyógyszerjelölt molekulák DJ-1 fehérjén kifejtett oxidatív stressz elleni védőfunkcióját vizsgálja.

Li adszorpciója részlegesen redukált grafén-oxid felülrtn

Selmeci Áron, BSc III. évf.

Témavezető: **Dr. Szieberth Dénes** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az energiaéhség mostanság az élet sokféle területén mozgatórugó, a gazdaságban az országok energiával kapcsolatos költségei, a szolgáltató szektorban (és a mindennapi életben) az energia felhasználása (közlekedés, kommunikáció, szórakoztatás stb.), az iparban az energia megteremtése (kőolaj-, földgázkitermelés, napból, szélből, vízből, nyert energiák), ill. a kutatásban (energiaforrások jobb kihasználása, energiátárolás és szállítás, transzformálás fejlesztése). Kutatásaim során az energiátároláshoz és transzformáláshoz (kémiai energiából elektromos energia létrehozása) kötődő Li-ionos akkumulátorok lehetséges anódjaként szereplő grafén ill. a grafén előállításai módjai miatt mérsékelt oxidált grafén és Li (ionok és atomok) interakcióját vizsgáltam kvantumkémiai módszerekkel (nem spin-polarizált sűrűségfunkcionál elmélettel, Density Functional Theory, DFT). A grafénfelületet, kondenzált policiklusos szénhidrogénekkkel (coronene, $C_{32}H_{14}$ és $C_{40}H_{16}$ {nanoribbon}) modelleztem. Számításaimban elszigetelt oxigénsoportokat és epoxi-csoportok együttes előfordulását is vizsgáltam. Ennek a témának a kutatása azért is időszerű, mert viszonylag kevés tudományos eredmény született a Li-grafén (illetve mérsékelt oxidált grafén) rendszerek vizsgálatában.



Pontos termokémiai számítások fluorozott etilgyökökre

Ganyecz Ádám, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Csontos József** tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Az 1990-es évek óta a fluorozott szénhidrogéneket széles körben használják hűtőközegként, habosítószerként és hajtógázként az ózonkárosító klórozott származékok helyettesítőjeként. Azonban ezeknek az anyagoknak nagy az élettartamuk és jelentős mértékben hozzájárulnak az üvegházhatáshoz. Ezen molekulák termodinamikai adatainak pontos ismerete – többek között – szükséges ahhoz, hogy az úgynevezett légköri modellek minél megbízhatóbb előrejelzést szolgáltatassanak a Föld éghajlatának alakulásáról. Munkám során a fluorozott etilgyököket vizsgáltam, ezenbelül is a $\text{CH}_3\text{-CHF}$, $\text{CH}_2\text{F-CH}_2$, $\text{CHF}_2\text{-CH}_2$ és $\text{CH}_3\text{-CF}_2$ molekulákat.

A számításokhoz csatolt-klaszter (CC) módszereket használtam. A geometriát CCSD(T) módszerrel cc-pVQZ báziskészlettel határoztam meg. A teljes energia kiszámításához a különböző járulékok additivitását feltételeztem a következő egyenlet alapján: $E_{\text{TOT}} = E_{\text{HF}}^{\infty} + \Delta E_{\text{CCSD(T)}}^{\infty} + \Delta E_{\text{CCSDT}} + \Delta E_{\text{CCSDT(Q)}} + \Delta E_{\text{mag}}^{\infty} + \Delta E_{\text{ZPE}} + \Delta E_{\text{DBOC}} + \Delta E_{\text{rel}}$. Az első tag (E_{HF}^{∞}) a teljes bázisra extrapolált Hartree-Fock energia, amit aug-cc-pCVXZ ($X=T, Q, 5$) bázisokon számolt eredményekből kaptam. $\Delta E_{\text{CCSD(T)}}^{\infty}$ a teljes bázisra extrapolált CCSD(T) energia, amit aug-cc-pCVXZ ($X=Q, 5$) bázissal kapott eredményekből határoztam meg. ΔE_{CCSDT} és $\Delta E_{\text{CCSDT(Q)}}$ jelöli a CCSDT és CCSDT(Q) járulékokat, amiket cc-pVTZ, illetve cc-pVDZ bázisokon számoltam. $\Delta E_{\text{mag}}^{\infty}$ a mag korrelációs járulék, amit az összes elektronnal számolt és a fagyott mag közelítéssel számolt CCSD(T) energiák különbségeként definiálhatunk. Ez is teljes bázisra lett extrapolálva a cc-pCVTZ és cc-pCVQZ bázisokon kapott eredményekből. A zéruspontri rezgési energiát (ΔE_{ZPE}) harmonikus oszcillátor közelítést alkalmazva CCSD(T) módszerrel cc-pVQZ bázissal határoztam meg. ΔE_{DBOC} a diagonális Born-Oppenheimer korrekció, amit CCSD módszerrel cc-pCVTZ bázissal vizsgáltam. ΔE_{rel} pedig a skalár relativisztikus hatások járuléka. Ezenkívül vizsgáltam a molekulák forgási és inverziós potenciális energiafelületét CCSD(T)/pVTZ szinten.

A kapott képződéshőket összevetve a korábbi adatokkal megállapítható, hogy minden esetben jól egyezik az eddigi értékekkel, és a $\text{CH}_2\text{F-CH}_2$ molekulát kivéve, mindegyik esetben az általam számolt érték a legpontosabb. Továbbá a $\text{CH}_2\text{F-CH}_2$ molekula esetében sikerült cáfolnom a korábbi rotációs potenciális energiafelületet, illetve a magasabb energiájú, C_s szimmetriájú, konformer létezését.

Szililén-komplexek szintenként való alkalmazhatóságának elméleti vizsgálata

Orbán Balázs, BSc II. évf.

Témavezető: **Szilvási Tibor** egyetemi tanársegéd
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék több évtizedes hagyománnyal rendelkezik a szénsoport divalens vegyületeinek elméleti tárgyalásának és kvantumkémiai vizsgálatának területén. Munkám témakörének középpontjában a 2006-ban Driess és munkatársai által előállított szililén áll. Különlegessége, hogy az első olyan vegyület, amelyben a divalens szilíciumatom hattagú gyűrűbe van foglalva és emellett, ugyan a gyűrű hét π -elektront tartalmaz, mégsem alakul ki delokalizált elektronrendszer.

A szililének nemkötő elektronpárjuknak köszönhetően kiváló donáló képességgel rendelkeznek, így számos, szintén reaktív csoportot sikerült stabilizálni, mint például a legegyszerűbb foszfinidént (:PH). Kísérleti eredményekkel megmutatták, hogy ezen csoportokat transzferálni lehet más szerves vegyületekre, így szintenként alkalmazhatók különböző reakciókban. Munkám során hat analóg szililén-komplex stabilitását és szintenként való alkalmazásuk lehetőségét tanulmányoztam, amelynek legfontosabb szempontja a transzfer reakciók lejátszhatósága. Emellett megvizsgáltam egy másik lehetséges reakciótípust, az addíciót, amely mellékreakcióként léphet fel a transzfer folyamatok kísérleti megvalósítása során. A reakciók eredményeinek értelmezéséhez nélkülözhetetlen a szililén és a hozzá kapcsolódó csoport közötti kötés vizsgálata, így erre több módszert is alkalmaztam kutatásom során.

A szililén-komplexek szintenként való alkalmazhatósága még kiforratlan kutatási területe a kémiának, azonban nagyon is ígéretesnek mutatkozik, mivel az ilyen reaktív csoportok (pl. foszfinidén) szintézis ekvivalensének megtalálása a mai napig megoldatlan probléma. Az általam vizsgált hat szililén-komplexből három alkalmasnak tűnik erre a szerepre.

Szilícium-karbid nanoklaszterek fotostabilitásának vizsgálata

Horváth Klaudia, BSc III. évf.

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

Wigner FK SZFI

BME TTK Atomfizika tanszék

Konzulens: **Beke Dávid** tudományos segédmunkatárs

Wigner FK SZFI

BME VBK Fizikai Kémia és Anyagtudományi tanszék

A szilícium-karbid (SiC) egy nagy keménységű, hővezetős, kémiai igen ellenálló, széles tiltott sávú indirekt félvezető. Számos előnyös tulajdonságának köszönhetően jól felhasználható a mikroelektronikában, magas hőmérsékletű és nagyfrekvenciájú berendezések gyártásához. Emellett biokompatibilitását is bizonyították már, ami a különböző biológiai felhasználások ígéretes alapanyagává teszi. Kiváló lumineszcens tulajdonságokkal rendelkező nanokristályai például fontos szerepet kaphatnak a biológiai képalkotás területén, mint SiC alapú festékp próbák.

Munkám során 10 nm-nél kisebb SiC alapú kvantumpöttyök fotostabilitását vizsgáltam. UV-fénnyel való több órás besugárzás után a nanokristályok tulajdonságait fotoemissziós és infravörös spektroszkópiás, illetve atomerő mikroszkópiás módszerekkel mértem. A besugárzást követően az emissziós spektrum bizonyos mértékben változott, de a lumineszcencia stabilitása megmaradt, emellett a nanorészecskék aggregációját és felületi kémiájuk megváltozását tapasztaltam. Az eredmények alapján az aggregációs folyamat és az emissziós spektrum között direkt korrelációt figyeltem meg. További vizsgálatokkal kimutattam, hogy a SiC nanokristályok fénnel történő interakció esetén képesek fotokatalitikus folyamatok beindítására.

Az elért eredményekkel egy lépéssel közelebb kerültünk a SiC nanokristályok fotokémiai tulajdonságainak megértéséhez, ezzel együtt fontos információkat kaptunk a SiC alapú lumineszcens festékp próbák biológiai képalkotásban való felhasználhatóságáról.

Munkámat az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai és Optikai Intézetben (1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.) végeztem Gali Ádám kutatócsoportjában, Beke Dávid irányítása mellett.

Gyenge savak és gyenge bázisok kölcsönhatása nemvizes közegben

Szakolczai Anett, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dorkó Zsanett** PhD hallgató

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Dr. Horvai György** egyetemi tanár

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A kutatócsoport, amelyben dolgozom, évek óta foglalkozik molekuláris lenyomatú polimerekkel, röviden MIP-ekkel. A MIP-ek készítése során gyengén savas jellegű molekula lép kapcsolatba gyengén bázikus jellegű molekulával aprotikus közegben. A két komponens közül az egyik, például a sav, egy monomer. A monomer polimerizációja során a köztük kialakult kölcsönhatás rögzítődik és többek közt ez felelős azért, hogy a képződő polimerben kialakul a bázis molekuláris lenyomata.

Munkám során gyenge savak és gyenge bázisok kölcsönhatásával foglalkoztam nemvizes közegben, mivel ez a jelenség fontos a MIP-ek működésének megértéséhez. Konduktometriás méréseink során megfigyeltük, hogy a gyenge savak és gyenge bázisok reakciója más aprotikus közegben, mint vízben, hiszen a várt 1:1 arány helyett más sztöchiometriai arányokban képeznek komplexet. A kialakult komplexek részleges ionos disszociációja miatt az oldatuk vezet az áramot. Több sav-bázis pár esetén a kitüntetett sztöchiometriai arány a 4:1 sav-bázis arány volt, amely valószínűleg stabilabb, mint az 1:1 illetve a 2:1 sav-bázis arányú komplex. Ez a következtetés összhangban van azzal, hogy azok a MIP-ek bizonyultak a legjobb tulajdonságúnak, amelyek a gyengén savas jellegű monomert és a gyengén bázikus jellegű reakciópartnerrel 4:1 arányban tartalmazták.

Tanszékünk kvantumkémiai csoportjában folyamatban lévő számítások azt mutatják, hogy ha több molekula savat adunk egy molekula bázishoz, akkor stabilabb komplex keletkezik, mint egyetlen savmolekulával. Ezen komplex inkább ionpár, mint hidrogénhidas komplex. Ez okozhatja a disszociációt, aminek köszönhetően vezet az elegy. Valószínű, hogy ez az ionpár képződés áll az imprintelés hátterében is.

Szolvatációs modellek vizsgálata pontos elméleti pK_a számításokhoz

Kováts Benjámín, MSc I. évf.

Témavezető: **Dr. Nagy József** egyetemi docens
BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék

Konzulens: **Komjáti Balázs** PhD hallgató
BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék

A savas disszociációs állandó (pK_a) a molekulák egy fontos kémiai tulajdonsága, mely meghatározhatja kémiai és biokémiai reakciók kimenetelét, a reaktivitást, és befolyásolhatja a reakciósebességet. A vegyületek pK_a értékeit különböző kísérleti módszerekkel, általában víz, DMSO, vagy acetonitril oldószerekben határozzák meg. Reakciómechanizmusok tanulmányozása, gyógyszerhatóanyagok hatásának modellezése, valamint új vegyületek szintézisének kidolgozása szempontjából elengedhetetlen, hogy a pK_a elméleti úton pontosan meghatározható legyen számításos kémiai módszerek alkalmazásával.

Ismert, hogy a deprotonálódás során bekövetkező szabadentalpia változás és egy vegyület pK_a értéke között lineáris összefüggés van. A deprotonáláshoz szükséges szabadentalpia kvantumkémiai számítási módszerekkel számítható, de értéke erősen függ az alkalmazott oldószermódelről minőségétől, és annak paramétereitől. Jelenleg az irodalomban nem található olyan módszer, amivel a deprotonálódási szabadentalpia megbízhatóan számítható lenne anélkül, hogy a vegyületeket önkényesen csoportosítanánk.

Jelen tanulmányban vizsgálom, a különböző oldószermódellekkel számolt deprotonálódási szabadentalpiák és kísérletileg meghatározott pK_a értékek közötti összefüggést. Összehasonlítom ezen implicit oldószermódellekkel számolt adatokat egy explicit oldószermolekulát is tartalmazó (ezáltal specifikusabb solvatációs modellt biztosító) számításokkal. A számításokat víz és acetonitril oldószerekre végeztem el. Az eredmények függvényében értékelem, hogy szükséges-e a semleges savak és a nitrogén tartalmú szerves bázisok konjugált savainak külön kezelése.

Aranyklaszterrel érzékenyített titán-dioxid bevonat: A jövő napeleme?

Barabás Júlia, MSc I. évf.

Témavezető: **Dr. Höltzl Tibor** fejlesztőmérnök
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulensek: **Dr. Veszprémi Tamás** professzor emeritus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Tegze Borbála PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Napjainkban egyre fontosabbá válik az, hogy olyan technológiák kerüljenek kidolgozásra, amelyek segítségével kiszolgálhatóvá válik az emberiség folyamatosan növekedő energiaigénye, illetve amelyekkel kiválthatók hagyományos energiaforrásaink. Ezen megújuló energiaforrások egyike a Nap, melyet többek között napelem segítségével hasznosíthatunk.

A nanotechnológia segítségével számos új, különleges és ami a legfontosabb, tervezhető tulajdonságú anyag hozható létre. A számítástechnika fejlődésével a nanoméretű rendszerek különleges tulajdonságainak modellezését, mélyebb megértését és tervezését lehetővé tevő kvantumkémiai számítások is elvégezhetőek ebben a mérettartományban. Munkám célja fém-klaszterekkel érzékenyített titán-dioxid bevonatok előállításának volt, melyhez mind elméleti, mind pedig kísérleti módszerek széles skáláját alkalmaztam.

A sűrűségfüggvény elméleten alapuló (DFT) számítások során két, különböző elemszámú titán-dioxid klasztert, aranyklasztereket, illetve titán-dioxid – arany klasztereket építettem, majd elvégeztem geometriai optimalizációjukat. A megfelelő funkcionál – bázis pár (LRC-wPBE és DEF2-TZVP) kiválasztása után az optimalizált klasztereknek kiszámoltam az alapállapotú energiáit, a gerjesztési energiáit és az ahhoz tartozó állapotokat. Emellett a gerjesztés során fellépő elektrontranszfert is vizsgáltam. A titán-dioxid és az arany klaszterek közötti kölcsönhatás vizsgálatához kötési energiákat, kötésiindexeket és az atomok töltéseit számoltam ki.

Az eredmények azt mutatták, hogy a tíz elemből álló titán-dioxid klaszter esetében az aranyklaszterrel való kölcsönhatás jobban tervezhető, tudjuk, hogy a két klaszter mely atomokon keresztül fog kötéseket kialakítani. Illetve ebben az esetben stabilabb klasztereket kaptam, mint a hat titán-dioxid egységből álló klaszterek esetében. A Häkkinen által publikált „divide and protect” elv itt is beigazolódott, az oxigénhez kötődő aranyatomok oxidált állapotba kerültek, míg a titánhoz kapcsolt, illetve a klaszter belső részét alkotó atomok töltése semleges maradt.

A gerjesztési energiák számításakor azt az eredményt kaptam, hogy az első gerjesztett állapot minden esetben triplétt állapotú. Az arany esetén a jelentős relativisztikus hatások miatt ez felveti a foszforeszcencia lehetőségét.

Mivel a fém klaszterek abszorpciós spektruma a méret függvényében változik, ezért a kolloidkémiai módszerek használata során fő célom az volt, hogy olyan arannyal adalékolt titán-dioxid vékonyréteget állítsak elő, amelyben az arany klaszterek mérete szabályozható. Az aranyat kétféleképpen juttattam be a rendszerbe; egyrészt interkalálva, másrészt a titán-dioxid rétegben a felületaktív anyag által létrehozott pórusokba inkubálva.

A készített vékonyrétegek vastagságának meghatározásának céljából UV-Vis spektrumokat vettem fel, emellett fluoreszcenciás és foszforeszcenciás méréseket végeztem. A kapott emissziós spektrumok segítségével összehasonlíthatóvá válik a különböző bevonatokban előállított arany-klaszterek mérete. Megfigyelésem alapján különböző templátanyagokkal különböző méretű arany szemcsék állíthatók elő. Az emissziós spektrumon a 0,03 ms-os késleltetési idő beállításával kapott sávok azt mutatják, hogy az arany foszforeszcencia tulajdonságokkal rendelkezik.

Fotoaktív szol-gél bevonatok előállítása és jellemzése

Fónagy Péter, BSc III. évf.

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

Konzulens: **Tegze Borbála** PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A TiO_2 és ZnO félvezető oxidok fotooxidatív katalizátorként használhatóak. A fotokatalízis legígéretesebb felhasználási módja a heterogén katalízis, por vagy vékonyréteg formájában. A TiO_2 és ZnO rétegek könnyen létrehozhatóak, változatos felületeken, változatos tulajdonságokkal. Az ilyen heterogén katalizátorokat könnyű kezelni és a megfelelő feladatra optimalizálni.

Munkám célja a félvezető oxidok pórusaiba impregnált színezékek fotooxidációjának vizsgálata, ez alapján a félvezetők és a gerjesztett színezék molekulák kölcsönhatásainak jellemzése.

TiO_2 , ZnO , TiO_2 - ZnO kompozit, és ezüsttel módosított TiO_2 rétegeket hoztam létre szol-gél mártásos (dip-coating) technikával. Ezek fotoaktivitását, optikai jellemzőit, rétegvastagságát és porozitását vizsgáltam. Vizsgáltam színezékek adszorpcióját a rétegek pórusrendszerében illetve ennek befolyásoló tényezőit is.

A rétegekbe diffundáló Na^+ ionok csökkentik a fotoaktivitást, ezért védőréteget kompakt SiO_2 réteget alkalmaztam. Vizsgáltam a védőréteg hatását a fotoaktivitásra, rétegvastagságra és porozitásra.

A fotoaktivitást UV és látható fényben is vizsgáltam. A vizsgálatok során a réteg pórusrendszerében vizes oldatból adszorbeált színezék bomlását követtem nyomon. Kiegészítő vizsgálatként színezék oldatba helyeztem rétegeket és így világítottam be őket.

Munkám során kimutattam a védőréteg kedvező hatását a fotoaktivitásra, az ezüstözött rétegek előnyös fotoaktív tulajdonságait, a pH hatását a színezékek felszívódására és a rodamin 6G színezék érzékenyítő hatását TiO_2 rétegekben. A megvizsgált ZnO és TiO_2 - ZnO kompozit rendszerek alapján megállapítottam, hogy ezek fotoaktivitása elmarad a tiszta TiO_2 aktivitásától.

A legkisebb nanokarika - cikloparafenilének stabilitásának kvantumkémiai vizsgálata

Faragó Endre Zoltán, BSc. II. évf.

Témavezető: **Szilvási Tibor** egyetemi tanársegéd
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az elmúlt évtizedek jelentős fejlődés ment végbe a nanotechnológia terén. Számos új anyagot sikerült szintetizálni, amelyek tulajdonságai rendkívül széles skálán mozognak. A nanorendszerek egy kiemelt részét képezik az úgynevezett alacsony dimenziós rendszerek, melyekre példa a fullerén (0D), szénnanocső (1D) és grafén (2D). Munkámban nulla és egydimenziós rendszereket vizsgáltam elméleti módszerekkel, hogy megkeressem a lehető legkisebb belső átmérővel rendelkező stabil szénnanocsövet. Elemeztem a nanocsövek alapegységének számító nanokarikák (n-cikloparafenilén) stabilitását a méretük függvényében. Hogy mennyire kicsi a legkisebb? Illetve mégis hogyan lehet még ennél is kisebbet stabilizálni? Ezekre a kérdésekre kívánok választ adni.

N,N-Dimetilanilin β -deutérium izotópeffektusának mechanisztikus vizsgálata fordított fázisú folyadékkromatográfiával

Maszler Péter, MSc II. évf.

Témavezetők: **Dr. Könczöl Árpád** kutató-fejlesztő

Richter Gedeon Nyrt.

Dr. Kupai József MTA posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

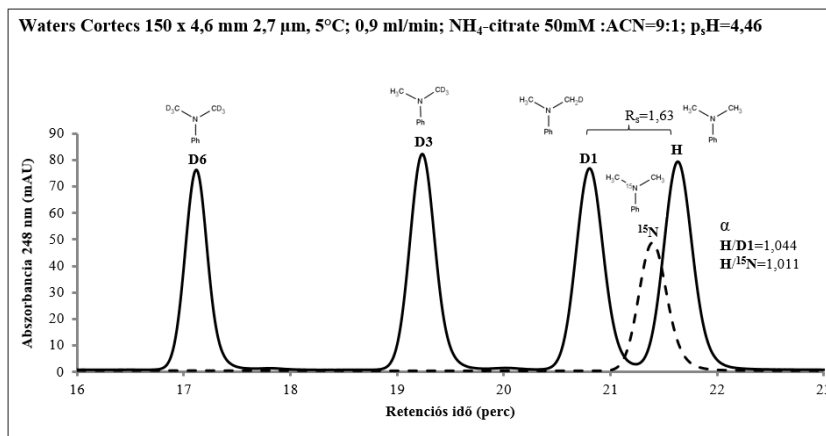
Konzulensek: **Dr. Balogh György Tibor** c. egyetemi docens

Richter Gedeon Nyrt.

Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Munkánk célja az *N,N*-dimetilanilin, illetve a metilcsoportjain egyszeresen, háromszorosan és hatszorosan deutertált izotopológjainak (**1. ábra**) elválasztása volt RP–HPLC-vel, azaz a bázikus nitrogénatomhoz képest β -helyzetű deutérium izotópeffektusát igyekeztünk kromatográfiás módszerrel vizsgálni. A HPLC mérés során izokratikus elúciót alkalmazva különböző szerves tartalom, ionerősség, hőmérséklet, pH és áramlási sebesség mellett optimalizáltam az elválasztást, majd az így kapott optimumon más oszlopokat is teszteltem. Az ionerősség elválasztásra gyakorolt hatását 5, 10, 20 és 50 mM-os ammónium-acetát pufferekben vizsgáltam. A hőmérsékletet 5–60 °C, míg az eluens pH-t 3,6–6,0 tartományban változtattam. Megállapítottam, hogy az elválasztás alapját (szelektivitás, felbontás) tisztán az izotopológok savi állandóinak (pK_a értékeinek) rendkívül kis különbségei szolgáltatják. A kapott eredményeket grafikusán ábrázoltam és részletesen tanulmányoztam az egyes paraméterek retencióra, szelektivitásra, felbontásra és csúcshimmetriára gyakorolt hatását. Ezen felül elvégeztem az elválasztás *van't Hoff*-elemzését ($\ln k-1/T$), amely révén sikerült kimutatnom, hogy csökkenő hőmérséklettel monoton növekszik a vizsgált izotópeffektus, azaz a kromatográfiás szelektivitás.



1. ábra Az elért legjobb elválasztás kromatogramja és testvegyületek ábrázolása.

Kísérleti élelmiszer-mátrixok kialakítása és alkalmazása a gluténtartalom meghatározására alkalmas analitikai módszerek fejlesztésében

Schall Eszter, MSc. II. évf.

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Konzulensek: **Kormosné Dr. Bugyi Zsuzsanna** egyetemi tanársegéd

Hajas Livia tanszéki mérnök

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Az élelmiszerekben jelen levő egyes gabonafehérjék túlérzékenységi reakciókat válthatnak ki. A betegek számára az egyetlen kezelési lehetőség a reakciót előidéző fehérjék étrendből történő kizárása. Az érintett fogyasztók érdekében elengedhetetlen a megbízható termékek elérhetősége és a megfelelő tájékoztatás. A glutén tartalmú gabonákra vonatkozóan jelölési kötelezettség van érvényben. Ahhoz, hogy a gluténmentességet biztosítani lehessen, megfelelő élelmiszergyártási technológia mellett megfelelő analitikai módszerek is szükségesek. Több eljárás is rendelkezésre áll a gluténtartalom meghatározására, ezek közül a legelterjedtebb az immunkémiai reakción alapuló ELISA módszer. Azonban a módszer alkalmazhatóságát, a kapott eredmények megbízhatóságát számos korlátozó tényező befolyásolja.

A felmerülő problémák egyik részét maga a meghatározandó fehérjék képezik. Ugyanis a glutén heterogén fehérjék komplex keveréke, amelyekre jellemző a genetikai és környezeti változékonyság. Emellett az élelmiszerek feldolgozása során alkalmazott eljárások (pl. hőkezelés) a fehérjeszerkezet módosulását okozhatja, mely változás hatással lehet a fehérjék mintából való extrakciójára vagy akár az immunreakcióra is. A problémakör másik része a módszertől illetve a módszer hiányosságaiból fakad. A kereskedelmi forgalomban kapható egyes ELISA kitek különböző antitesteket használnak fel a glutén meghatározására, ami azt jelenti, hogy különböző fehérjéket illetve epitópokat ismernek fel. Emellett a kitekben alkalmazott extrakciós oldatok is eltérhetnek, így különböző extrakciós hatékonyságot eredményezve. A megfelelő extrakciós oldat megválasztása szintén fontos kérdés, ugyanis az oldatnak képesnek kell lennie kioldani a mintában lévő összes fehérjét natív illetve feldolgozott formában is.

A fent említett problémákkal együtt a mért eredmények megbízhatóságának ellenőrzésének gátat szab a validált módszerek illetve a nemzetközileg elfogadott referencia anyagok (RM – reference material) hiánya. A kutatómunka fő célkitűzése a kutatócsoport korábbi eredményeinek felhasználásával olyan, gliadin/glutén fehérjét adott mennyiségben tartalmazó kísérleti modellmátrixok –referencia-anyag jelöltek- kialakítása, és ezek alkalmazása a lehetséges analitikai hibaforrások feltárásában, illetve a termék-előállítás során lejátszódó, az analitikai eredményt befolyásoló faktorok azonosításában. A kutatómunka eredményei hozzájárulhatnak az analitikai módszerek fejlesztéséhez, teljesítményjellemzőik javításához.

R₂B-PR'₂ foszfinoboránok reverzibilis hidrogénaddíciójának kvantumkémiai vizsgálata

Zódi Levente Zsolt, BSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Szieberth Dénes** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A hidrogén fontos reaktáns a szerves-és petrokémiában, valamint potenciális energiaforrás lehet üzemanyagcellákban. Ennek ellenére aktiválása napjainkban is főleg drága és nem környezetbarát átmenetifémekkel történik. A 2000-es évek közepe óta azonban ismertek főcsoportbeli elemek, melyek képesek aktiválásra, ekkor fedezték fel a szinglett karbének effajta reaktivitását. Azóta számos rendszert találtak, melyek alkalmasak a feladatra: ilyenek azok a Lewis-féle sav-bázis párok, melyek a sztérikus hatások következtében megőrzik aktív centrumaikat. Elnevezésük az irodalomban frusztrált Lewis párok (FLP).

Az FLP-k legismertebb, és leghatékonyabb fajtája a foszfinoboránok. Kísérletileg bizonyított hidrogénaktiváló hatások, azonban főként az intermolekuláris foszfin-borán komplexek voltak eddigi kutatások középpontjában. Tisztázott reaktivitásuk, valamint hidrogénaktiváló mechanizmusuk is.

Dolgozatomban a kevésbé tárgyalt R₂B-PR'₂ szerkezetű foszfinoboránokat vizsgálom, melyek számos okból érdekesek lehetnek. Mivel a foszfor és bór között közvetlen kötés található, hidrogénnel lejátszódó reakciójuk mechanizmusa a többi foszfinoborántól nagyban eltérő lehet, az eltérő mechanizmus következtében pedig eltérő lehet a szubsztituensek elektronikus hatása is.

Kvantumkémiai számítások segítségével feltérképeztem hidrogénnel való reakciójuk teljes potenciális energia felületét, számos különböző szubsztituens-párosítást vizsgálva. A foszforon általánosan alkalmazott elektrondonor metil, terc-butil csoport mellett a hidrogén, fluor, klór és szililcsoport reaktivításra, termék termoneutralításra, töltéseloszlásra, reakciómechanizmusra kifejtett hatását is vizsgáltam. A bóron a hidrogén, metilcsoport, valamint az erős elektronszívó trifluormetil és pentafluorofenil csoportokat használtam. A teljes potenciálfelület és a különböző szubsztituensek rá kifejtett hatásának ismeretében a későbbiekben könnyebb lehet hasonló rendszereket fejleszteni, melyek képesek hidrogénaktiválására.

Szimultán termo-optikai mikroszkópia és kalorimetriai módszer kidolgozása

Barbély Gréta, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd** egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A jelen TDK célja, hogy bemutasson egy olyan mérés technikai módszert, amely alkalmas arra, hogy szimultán vizsgáljuk egy polimer kristályosodási folyamatának exoterm - endoterm hőváltását, és látványosan szemléltethetjük a kristályképződést. A munka során bemutattam ennek egy lehetséges megvalósítását. Felkutattam a minták előkészítésének lehetséges metódusait, majd ezeket elemezve megállapítottam, hogy a két lehetőség közül, ahol az egyikben rézszalaggal rögzítettem egymáshoz a két üveglap közé helyezett mintát – bár praktikusabb – de mérési hibához vezet. Így a második lehetőséget választottam: a vizsgált anyag mintát két üveglap közé helyeztem, majd összenyomtam, ügyelve arra, hogy ne használjak túl sok minta anyagot, ami esetlegesen kifolyhat.

Beállítottam a mérés technika egyes elemeit. Elsőként kidolgoztam egy általam, és a jövőben felmerülő polimer vizsgálatoknál jól használható mérés programot. Másodsorban kalibrációt végeztem, a differenciális pásztázó kalorimetria (DSC) berendezések kalibrálására alkalmas indiummal a differenciál termo-analitikai (DTA) készüléken. Ezt felhasználva megkezdtem a polimer minták mérését, melyhez már a polarizációs optikai mikroszkópot (POM) is hozzákapcsoltam. A digitális kamerán keresztül, egy meghatározott időpillanattól kezdve felvételeket készítettem a DTA adatfelvétellel szimultán működésben. Ennek köszönhetően vizuálisan követhetővé tettem a kristályosodás folyamatát, ennek segítségével a jövőben számos új ismerethez juthatunk, és remélhetőleg tisztábban láthatjuk a polimerek kristályosodásának hátterében lezajló folyamatokat.

Redukált grafén-oxid tartalmú hidrogélek

Sós László, BSc IV. évf.

Témavezető: **László Krisztina** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Berke Barbara** PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A termoreszpozív poli(N-izopropil-akrilamid) (PNIPA) hidrogél sokoldalú felhasználhatóságának és biokompatibilitásának köszönhetően széleskörű érdeklődésre tart számot. Többek között lágy természete, kis határfelületi feszültsége és nagy áteresztőképessége teszi lehetővé például szabályozott gyógyszerhatóanyag-leadó rendszerként való felhasználását. Kiváló duzzadási tulajdonságait és reverzibilis alakváltozását kihasználva pedig a szenzorikában és aktuátor fejlesztésben alkalmazható. Gyakorlati elterjedésének azonban határt szab, hogy mechanikai tulajdonságai jellemzően gyengék, hidrofób anyagok megkötésére és szállítására kevésbé alkalmas, valamint az egyes paraméterek javítása csak mások rovására érhető el. Ezen korlátozó tényezőkön való felülemelkedést teheti lehetővé kompozit rendszerek kialakítása.

Napjaink legelterjedtebben használt töltőanyagai a különböző szén nanorészecskék. Közülük is kiemelkedik a grafén, mert rendkívüli mechanikai és hővezető tulajdonsága mellett speciális szerkezete miatt kiváló erősítő fázisként szolgálhat, és újabb érzékenységet kölcsönözhet a kompozit gélrendszernek. Hátránya, hogy vízben rosszul diszpergálható, így nem alkalmas homogén hidrogél nanokompozitok készítésére, ellentétben a grafén-oxiddal (GO), amelyből amfifil jellegének köszönhetően könnyen előállítható stabil vizes szuszpenzió. A GO tulajdonságai a grafénhez képest azonban rosszabbak, a tökéletes hatszöges szerkezet hiánya miatt. Számos redukációs lehetőség áll rendelkezésre, melyek során a GO-ból közel grafén-szerkezetű redukált grafén-oxidot (rGO) kapunk. Amellett, hogy ez az eljárás jóval olcsóbb és termelékenyebb lehet a többi grafén előállítási módszernél, az rGO a grafént helyettesítő töltőanyagként lehet jelen hidrogél nanokompozitokban.

Munkám során vizsgáltam a nano-töltőanyagként többféle koncentrációban bevitt GO és rGO poli(N-izopropil-akrilamid) hidrogél kompozitok tulajdonságaira gyakorolt hatását. Új módszert dolgoztam ki rGO tartalmú PNIPA gélek előállítására, valamint jellemeztem az alkalmazott nanorészecskéket és kompozitjaikat.

Mintáim karakterizálásához UV-VIS, Raman- és röntgengerjesztéses fotoelektron-spektroszkópiát, termogravimetriát, rugalmassági modulus- és duzzadásfok mérést alkalmaztam.

Szálerősítésű hibrid kompozitok: szerkezet és ütésállóság

Várdai Róbert, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Renner Károly** tudományos főmunkatárs
MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport

A polimer alapú kompozitok fő fejlesztési és kutatási célja szerkezeti anyagként való alkalmazásuk. Szálerősítésű kompozitokat már évtizedek óta alkalmaznak, például az autó- és repülőgépiparban legelterjedtebb erősítőanyagok az üvegszál és a szénszál. A környezettudatosság növekedésével azonban a figyelem a természetes erősítőanyagok felé fordult, és már kereskedelmi forgalomban is kaphatóak különböző faliszt erősítésű kompozit elemek. A faliszt megfelelő határfelületi kölcsönhatás kialakulása esetén növeli a kompozitok merevségét és szilárdságát, emellett pedig nagy mennyiségben előállítható és viszonylag olcsó. A fő probléma a természetes szálerősítésű szerkezeti anyagokkal – mely a faliszt erősítőanyagra különösen igaz – hogy ütésállóságuk meglehetősen rossz. Korábbi kutatások során különböző elasztomer társítóanyagok segítségével próbálták az ilyen polimer/faliszt kompozitok törési ellenállását növelni, de a természetes erősítőanyagok relatív kis szilárdsága valamint a fellépő nagyszámú mikromechanikai deformációs folyamat miatt ez a megközelítés nem volt eredményes. Mostanában ezért előtérbe kerültek az eltérő tulajdonságokkal rendelkező erősítőanyagok kombinációjával létrehozott, újfajta, úgynevezett hibrid kompozitok. Az egyes komponensek különböző tulajdonságokkal ruházhatják fel a kompozitot. Az előkísérletek alapján megállapítottam, hogy polimer szálak (például polietilén-tereftalát (PET)) alkalmazása nagymértékben növelheti az ütésállóságot. A cél a faliszt és a PET-szálak tulajdonságainak kombinációjával új, megfelelő ütésállósággal rendelkező hibrid kompozit alapanyag fejlesztése, illetve a kompozitokban fellépő határfelületi kölcsönhatások szabályozásával és a deformációs folyamatok analízisével jobb ütésállóságú kompozit létrehozása. A hibrid kompozitokat belső keverőben vagy kétcsigás extruderen homogenizáltam, majd mintákat préseltem és fröccsöntöttem mechanikai és szerkezeti vizsgálatokhoz. A szakítóvizsgálat során a deformációs folyamatokat akusztikus emissziós mérés segítségével vizsgáltam. Az ütésállóságot szabványos Charpy, és műszerezett törés vizsgálatokkal mértem.

Új mágneses nanobiokatalizátorok

Juhász Viktória, BSc IV. évf.

Témavezetők: Dr. Poppe László egyetemi tanár

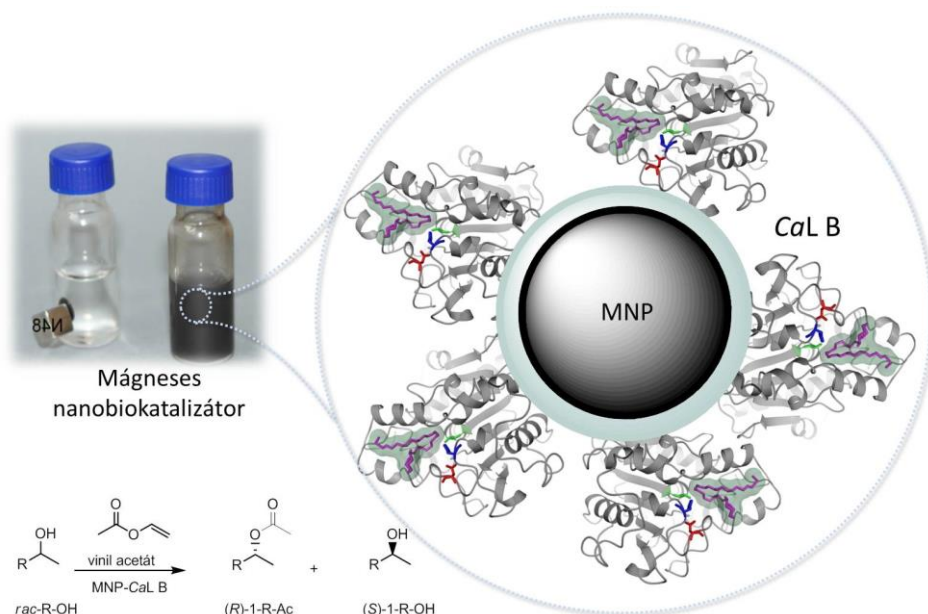
BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék

Weiser Diána doktorjelölt

BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék

A dinamikusán fejlődő iparágak egyre hatékonyabb, környezetbarát technológiákat követelnek meg: a biokatalizátorok alkalmazásával lehetőség nyílik ezek megvalósítására. Az enzimek széles körben alkalmazhatók az iparban, azonban a vizes fázisú reakciókból nehézkes és drága a katalizátorok visszanyerése, amik ráadásul a terméket is szennyezhetik. Erre jelenthet megoldást a szilárd hordozóhoz történő rögzítésük. A modern biotechnológia eszköztárában egyre nagyobb teret hódítanak az ún. nanoanyagok. Különösen nagy lehetőség rejlik a nanoméretű vas-oxid alapú hordozókban, melyek nagy fajlagos felülettel rendelkeznek, biokompatibilisek, felületük sokrétűen módosítható, emellett egyszerűen mágnesesezhetőek, ami jelentősen megkönnyíti a fázisszeparációs műveleteket.

TDK munkám célja olyan mágneses, nanoméretű részecskék szintézise és felületi funkcionálizálása, amelyek alkalmasak lehetnek enzim molekulák eredményes és stabil immobilizálására. Részletesen foglalkoztam a mágnesezhető nanorészecskék méretének, a funkciós csoportok felületi elhelyezkedésének és az enzimmegkötés körülményeinek optimalizálásával. Az enzimmegkötési kísérletekhez egy gyógyszeriparban is releváns enzimet, a *Candida antarctica* B lipázt alkalmaztunk. Az így létrehozott nanobiokatalizátorokat dinamikus fényszóródás mérés, pásztázó elektronmikroszkóp és energiadiszipatív röntgen spektroszkópia segítségével jellemeztük. Az enzimmegkötési komplexek biokatalitikus képességeit racém alkoholok kinetikus felbontásaiban vizsgáltuk.



Halloysite nanorészecskéken adszorbeált kvercetin stabilizáló hatékonysága polietilénben. Feltételezések és valóság.

Sárközi Márk, MSc I. évf.

Témavezető: **Dr. Földes Enikő** címzetes egyetemi tanár
MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport

Konzulens: **Hári József** PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A polietilén (PE) feldolgozás és alkalmazás során bekövetkező, káros kémiai reakciói stabilizátorok alkalmazásával gátolhatók. A gyakorlatban fenolos antioxidánsokat használnak a hő, nyírás és oxigén hatására képződő reaktív gyökök további reakcióinak megakadályozására, valamint háromértékű szerves foszforvegyületeket a hidroperoxidok semleges alkohollá bontására. Az utóbbi években egyre szélesebb körben vizsgálják a természetes antioxidánsok stabilizáló hatékonyságát poliolefinekben. A kvercetin hatékony antioxidánsnak bizonyult polietilénben. Hátránya, hogy magas az olvadási hőmérséklete, kicsi az oldhatósága és elszínezi a polimert. 0,1 m% kvercetinnel stabilizált PE-ben tús kristályok kiválása figyelhető meg. Feltételezéseink szerint a kvercetin molekulák homogénebben eloszthatók, valamint színező hatásuk csökkenthető, ha a polimerbe történő bekeverés előtt nanoméretű hordozó szemcséken adszorbeáljuk. További feltételezésünk volt, hogy az antioxidáns hordozójaként halloysite ásvány nanocsöveket alkalmazva a hosszúidejű stabilizáló hatékonyság javítható, az antioxidáns molekulák fokozatos deszorpciója révén. Előzetes kutatásaink azt mutatták, hogy a kvercetin molekulák kölcsönhatása a halloysite szemcsékkel olyan erős, hogy a felületi teljes borítottság alatti mennyiségek csak igen kevéssé járulnak hozzá a polimer stabilizálásához. Kutatásom célja annak meghatározása volt, hogy a felületi borítottságot biztosító koncentrációnál nagyobb mennyiségű kvercetin molekulák hogyan hatnak a PE feldolgozási és alkalmazási stabilitására, az adalék eloszlásra, valamint a polimer elszíneződésére.

Halloysite nanoszemcséket oldatból különböző mennyiségű kvercetinnel vontam be, majd termikus módszerekkel (TGA) és infravörös spektroszkópiával jellemeztem. Adalékmentes PE port foszfonit antioxidánssal és a kvercetinnel bevont halloysite mintákkal előzetes keverést követően extrúziós módszerrel homogenizáltam. Összehasonlításként vizsgáltam az adalékok hatását önmagukban is. A homogenizált PE mintákat különböző módszerekkel jellemeztem: FT-IR spektroszkópia, folyásindex- és színmérés, oxidációs index vizsgálat, és optikai mikroszkópia. Gyorsított öregítéssel tanulmányoztam a polimer várható viselkedését alkalmazás során. A dolgozatban részletesen ismertetem a kísérleteket és az eredményekből levonható következtetéseket.

Az izotaktikus polipropilén optikai tulajdonságait befolyásoló szerkezeti tényezők felderítése

Molnár János, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd** egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulensek: **Sepsi Örs** tudományos segédmunkatárs
BME Atomfizika Tanszék

Ujhelyi Ferenc tudományos segédmunkatárs, laborvezető
BME Atomfizika Tanszék

Az izotaktikus polipropilén (iPP) napjaink egyik legdinamikusabban fejlődő tömegműanyaga, melyet nagy mennyiségben alkalmaznak a csomagolóiparban. Az ezen a területen alkalmazott műanyagok esetében az átlátszóság kulcsfontosságú tényező, vagyis olyan amorf polimereket alkalmaznak előszeretettel, melyek jó optikai tulajdonságokkal rendelkeznek.

Az iPP szemikristályos polimer, amelyben a kristályos fázis jelenléte miatt, jelentős fényszórással és ezáltal nagy homályossággal, illetve rossz átlátszósággal, kell számolni a hagyományos feldolgozás körülményei között. A homályosság csökkentése céljából napjainkban, az ipari gyakorlatban nagy hatékonyságú speciális göcképzőket, úgynevezett *clarifiereket* alkalmaznak iPP-ben.

Kutatásom célja azon szerkezeti tényezők felderítése, melyek döntően meghatározzák egy szemikristályos polimer homályosságát, illetve egy olyan modell készítése, mellyel az optikai tulajdonságok leírhatók, értelmezhetők. A modell megalkotásához előzetes méréseket végeztem különböző szerkezetű (gócsűrűség, szferolitméret, mintavastagság) mintákon a lehető legtöbb mérési módszerrel azért, hogy minél többet megtudjak a homályosságot befolyásoló tényezőkről.

A modell megbízhatóságát különböző vastagságú mintákon ellenőriztem, amiket szintén nagyon eltérő körülmények között készítettem el, hogy a modellt minél szélesebb homályossági tartományban ellenőrizhessem. Az előzetes mérések alapján, a modell szórási egysége a szferolit. Egyetlen szferolit mért és számított szórási képe jó egyezést mutat. A valódi mintát szóró egységek sokaságával jellemeztem és ebben az esetben is volt összhang a becsült és mért értékek között. A modell jól leírja a homályosság szferolitmérettől, mintavastagságtól, hullámhossztól való függését, illetve a szórás iránykarakterisztikáját is. A becsült és mért értékek egyezése egyelőre még nem pontos, a modell finomhangolása még folyamatban van. A célul kitűzött modell, ha a finomhangolás eredményes lesz jelentősen gyorsíthatja majd a clarifierek fejlesztésének folyamatát.

Fotokatalitikus grafén-oxid(GO) nanokompozitok előállítása

Justh Nóra, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Szilágyi Imre Miklós** tudományos munkatárs

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

Nagy fajlagos felületüknek és jó elektromos tulajdonságaiknak köszönhetően a grafit és származékai, mint a grafén-oxid is, napjainkban igen széles körben kutatottak. A grafén-oxid (GO) alapú kompozitoknak számos és ígéretes felhasználási lehetősége nyílik az elektronika, az optika, energiátárolás, a szerves napelemek és a fotokatalízis területén. GO alapú kompozitok előállítására több módszer is megtalálható az irodalomban. Azonban az általam választott, gázfázisú, felületkontrollált módszert, az atomi rétegleválasztást (ALD) GO-n eddig csak egyszer végeztek. A szén nanoszerkezetek közül ALD csak szén nanocsövekre, utólag funkcionizált grafénre, redukált grafén-oxidra(rGO) és fullerénre valósult meg eddig döntően (fullerénre nemrég általam történt először ALD).

TDK munkám célja oxid nanorétegek növesztése volt GO-ra, és a nanokompozitok fotokatalitikus tulajdonságainak felderítése. Először a legelterjedtebb, módosított (improved) Hummers eljárással grafitból GO szuszpenziót állítottam elő, melyből liofilizációval készítettem szilárd GO mintákat az ALD-hez. A választás azért a GO-ra esett, mert a grafénhez és a redukált grafén-oxidhoz (rGO)-hoz képest ezen van a legtöbb funkciós csoport, melyek nukleációs helyekként szolgálnak az ALD-hez. Mivel az atomi réteg leválasztáshoz kritikusak a funkciós csoportok a hordozó nanoszerkezetek felületén, ezért kíváncsi voltam, hogy a módosított Hummers módszer lépései során hogyan alakulnak ki a funkciós csoportok. Ehhez a GO előállítás minden lépésénél mintát vettem, és ezeket megmértem TG-DTA/MS, FTIR, XRD, SEM-EDX technikákkal. ALD-vel 3 félvezető fém-oxidot választottam le a GO mintákra 80°C-on: TiO₂-t, Al₂O₃-t és ZnO-t, amikhez titánizopropoxid [Ti(OC₃H₇)₄], trimetil-alumínium [(CH₃)₃Al] valamint dietil-cink [(CH₃-CH₂)₂Zn] és H₂O prekursorokat használtam. Az alacsony ALD hőmérsékletre a funkciós csoportok hőérzékenysége miatt esett a választás. A kész kompozitokat és tulajdonságaikat TG-DTA/MS, FTIR, XRD, SEM-EDX és TEM módszerekkel vizsgáltam. Fotokatalitikus aktivitásuk feltérképezéshez metil-narancs festék oldatába raktam a kompozitokat, majd UV fényben figyeltem a festék bomlását.

A módosított Hummers módszert termikus és fejlődőgáz-analitikai mérésekkel végigkövetve látható volt a funkciós csoportok kialakulása, módosulása a funkcionizálási reakció és az azt követő mosási lépések során. Kimutattam továbbá, hogy a hidroxil, epoxi és karboxil csoportok mellett szulfonsav csoportok is vannak a GO felületén. A GO fejlődőgáz-analitikai vizsgálata megmutatta azt, hogy melyik csoport mikor szakad le a hevítés során; már 100 °C alatt kezdett eltávozni az OH funkciós csoportok egy része. A GO-ra történő ALD leválasztások sikerességét megerősítették a SEM-EDX és TEM mérések. A porröntgen-diffraktogramok kimutatták, hogy a ZnO már 80°C-on leválasztva is kristályos, míg a TiO₂ és Al₂O₃ amorf volt. A GO önálló fotokatalitikus hatásán az amorf TiO₂ jelentősen javított, ami bizonyítja, hogy az ALD-vel leválasztott amorf TiO₂-nak is van fotokatalitikus hatása. A ZnO, mivel kristályos volt, a legjobb fotokatalizátornak bizonyult GO-val kompozitban. Az amorf Al₂O₃ pedig referenciaként szolgált, hiszen mivel nincs önmagában fotokatalitikus hatása, blokkolta a GO felületének egy részét, és így csökkentette a GO hatékonyságát.

Lignin diszpergálhatóságának javítása polietilénben a stabilizáló hatás növelésére

Mezei Gábor, MSc I. évf.

Témavezető: Dr. Földes Enikő címzetes egyetemi tanár
MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport

Konzulens: Kun Dávid PhD hallgató
BME VBK FKAT Műanyag- és Gumiipari Laboratórium

A polietilén (PE) stabilizálása elengedhetetlen ahhoz, hogy megakadályozzuk a polimer káros kémiai reakcióit (degradációját) feldolgozás és alkalmazás során. Stabilizátorként olyan antioxidánsok alkalmazhatók, amelyek a polimerből képződő reaktív (alkil, peroxi, oxí) gyökökkel reakcióba lépnek, vagy elbontják a degradáció kezdeti szakaszában képződő hidroperoxidot stabil vegyületté. A stabilizátorokkal szembeni követelmény, hogy kellő kémiai hatékonysággal rendelkezzenek, jól oldódjanak a polimerben, továbbá a belőlük képződő reakciótermékek ne vigyék tovább a degradációt és ne legyenek káros hatásúak. A gyakorlati életben legalább két stabilizátor kombinációját, egy hidrogén donor fenolos antioxidánst és egy peroxid bontó szerves foszforvegyületet alkalmaznak. Az utóbbi években kétségek merültek fel a szintetikus fenolos antioxidánsok átalakulási termékeinek az emberi egészségre gyakorolt hatásával kapcsolatban, ezért egyre szélesebb körben tanulmányozzák a természetes antioxidánsok alkalmazásának lehetőségeit a polimerek stabilizálására. A lignin egy természetes polifenol, a fa alkotórésze, a papírgyártás mellékterméke, ezért nagy mennyiségben, olcsón hozzáférhető. Különböző eljárással nyerik ki fából vagy egyéb mezőgazdasági nyersanyagból (pl.: szalma, kukoricaszár). A növényekben megtalálható lignin térhálós, keresztkötésekkel rendelkező molekula, amelyet nem lehet feloldani, vagy megömleszteni. Szerkezete és funkciói csoportjai nagymértékben függenek a kinyerési eljárástól. A szakirodalmi adatok és a Közös Laboratóriumban folytatott korábbi kutatások azt mutatták, hogy a lignin stabilizáló hatással rendelkezik polietilénben (PE), de szükséges a homogén eloszlása a polimer mátrixban. Kutatásom célja eljárás kidolgozása volt a lignin megfelelő diszpergálására polietilénben ahhoz, hogy kellő stabilizáló hatékonyságot érjünk el.

A munka során különböző adalékanyagok felhasználásával tanulmányoztuk a lignin diszpergálhatóságát polietilénben. A kísérleteket egy lignoszulfonát típusal végeztük, összehasonlításként egy gőzrobbantott lignint is vizsgáltunk. A kutatás első szakaszában tanulmányoztuk a lignin diszpergálhatóságát etilén-glikolban (EG) és két polietilén-glikolban (PEG-A és PEG-B), illetve keverékekben. A kísérleteket szárított és légnedves ligninnel is elvégeztük. Az eredmények azt mutatták, hogy a légnedves lignin jobban diszpergálható, mint a szárított. A megfelelő stabilizáló hatás eléréséhez olyan diszperzió (paszta) kidolgozása volt a cél, ami a lehető legnagyobb mennyiségben tartalmazza a lignoszulfonátot és a lehető legkevesebb mennyiségben az etilén-glikolt.

Az eredmények alapján 85 m/m% (szárazanyag tartalomra vonatkoztatva) légnedves lignoszulfonátot és 15 m/m% EG/PEG-A/PEG-B 1/4/1 tömegarányú oldószerkeveréket tartalmazó pasztát választottunk és készítettük el a további kísérletekhez. Összehasonlításként gőzrobbantott ligninnel is készítettünk egy ugyanilyen összetételű pasztát. A kutatás második fázisában mesterkeverékeket készítettünk kapcsolóanyagok felhasználásával néhány előkísérlet után. Az előkísérleteket maleinsav anhidriddel ojtott PE (MAPE) kapcsolóanyaggal végeztük. Tanulmányoztuk a lignoszulfonát nedvességtartalmának, a lignin direkt bekeverésének vagy előzetes diszpergálásának (paszta alkalmazásának), a paszta lignoszulfonát tartalmának, valamint a komponensek beadagolási sorrendjének hatását a mesterkeverék jellemzőire. Az előkísérletek azt bizonyították, hogy a lignin megfelelő homogenizálásához elengedhetetlen előzetes diszpergálása a mesterkeverék készítése előtt. Különböző összetételű, PE-alapú mesterkeverékeket gyártottunk a kiválasztott összetételű paszta, valamint MAPE, cink-ionomer (ION) és egy-egy arányú keverékük, mint kapcsolóanyagok felhasználásával. A mesterkeverék lignin tartalmát 10-50 m/m% arányban változtattuk. Megállapítottuk, hogy a mesterkeverék fázisszerkezetét és jellemzőit a lignintartalom, továbbá a lignin és a kapcsolóanyag típusa is befolyásolja. A lignoszulfonát tartalmú mesterkeverékek lényegesen homogénebbek, mint a gőzrobbantott ligninen készítettek. A kísérleti eredmények alapján 20 m/m% lignin és különböző kapcsolóanyag tartalmú mesterkeverékeket választottunk a további munkához. A kutatás harmadik szakaszában a kiválasztott mesterkeverékekkel 0,1 – 10,0 m/m% lignin tartalmú polietilén mintákat (kompaundokat) gyártottunk extrúziós eljárással. A PE feldolgozási stabilitásának biztosításához foszfát típusú szekunder antioxidánst is alkalmaztunk. A kompaundok jellemzése alapján megállapítottuk, hogy a polimer termo-oxidatív stabilitását 2 m/m% lignin tartalom felett a kapcsolóanyag típusa is befolyásolja. Bár a gőzrobbantott lignin lényegesen kevésbé homogenizálható, mint a lignoszulfonát, a termo-oxidatív stabilizáló hatékonysága jobb. Ez az eltérés a két lignin típus eltérő kémiai szerkezetével magyarázható.

Reverzibilisen duzzadó redox érzékeny poli(aszparaginsav) hidrogélek

Barczikai Dóra, BSc III. évf.

Témavezető: **Dr. Szilágyi András** egyetemi docens
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Molnárné Krisch Enikő** PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A polimer hidrogélek váza olyan háromdimenziós hidrofil polimer térháló, amely vizes közegben duzzad, de nem oldódik fel. Nagy vízmegkötő képességük, a szövetekhez hasonló mechanikai tulajdonságaik, kis felületi sűrűségük, viszkoelasztikus jellegük, várható biokompatibilitásuk és biológiai lebonthatóságuk számos gyógyászati alkalmazást tesz lehetővé, többek között a célzott rákterápia és a mesterséges szövetépítés területén. A hidrogélek fontos csoportját képezik a rezponzív gélek, melyek egy előre meghatározott válaszreakcióval – pl. térfogatváltozás – reagálnak bizonyos környezeti paraméterek, pl. a pH, a hőmérséklet vagy a redox potenciál megváltozására¹.

A tiol-diszulfid átalakulásnak kiemelt biológiai jelentősége van, mivel a szervezetben előforduló redox folyamatok kulcsmediátora a tiolcsoportot tartalmazó glutation tripeptid. A glutation redukált formájának koncentrációja lényegesen eltérő a sejten belüli és sejten kívüli terekben, emellett emelkedett koncentrációban van jelen a rákos sejtekben. Az ebből következő redox potenciál gradiens adja az alapját számos redox-rezponzív hatóanyag-hordozó mátrix fejlesztésének, amelyekkel elsősorban tumoros megbetegedéseket kezelnék a jövőben.

Munkám célja olyan hidrogél előállítása volt, mely redox hatásra reverzibilis térfogatváltozással reagál, így szabályozott hatóanyag-leadó rendszer alapja lehet. A hidrogélek kiindulási anyagának az aszparaginsavat választottam, melyből jól meghatározott molekulatömeggel és olcsón állíthatóak elő tervezett tulajdonságokkal rendelkező polimerek.

A hidrogélek előállításához tiolcsoportokkal módosított poliaszparaginsavat kémiaiilag térhálósítottam vizes közegben egy redukcióra nem érzékeny keresztkötő molekulával. A permanens keresztkötéseknek köszönhetően az előállított hidrogélek redukáló közegben duzzadtak, de nem oldódtak fel. Meghatároztam az előállított gélek duzzadásfokát és rugalmassági modulusát különböző redox potenciálú környezetben, illetve ezen tulajdonságok változásának reverzibilitását az összetétel függvényében.

¹ Peppas NA, Hilt JZ, Khademhosseini A, Langer R. Hydrogels in Biology and Medicine: From Molecular Principles to Bionanotechnology. *Advanced Materials*. 2006;18(11):1345-1360.

Elasztomerrel módosított PP/szizál kompozitok ütésállósága

Bartos András, MSc I. évf.

Témavezető: **Dr. Móczó János** tudományos főmunkatárs
MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

A munkám során különböző összetételű kompozitokat állítottam elő, a szizál, mint természetes szál hatását vizsgáltam heterogén polimer rendszerekben. A cél a kompozit ütésállóságának a javítása volt, továbbá vizsgáltam a minták tönkremenetele során lezajló mikromechanikai deformációs folyamatokat. A szizál szálak nagyobb szilárdsággal, nyúlással és alaki tényezővel rendelkeznek, mint a széles körben alkalmazott faliszt. Azt szerettem volna gyakorlatban is kideríteni, hogy az ütésállóság javulni fog-e, ha a faliszt helyett szizált keverünk a kompozitba. Összehasonlítottam azt is, hogy az SEBS-g-MA és az SEBS (+MAPP) által kialakított szerkezet milyen hatással van a tulajdonságokra. Több sorozatot is mértem, változtattam a töltőanyag tartalmát, az elasztomer tartalmát, valamint különböző szálak alkalmazását is kipróbáltam. A klasszikus mechanikai vizsgálatok mellett szabványos ütésállósági vizsgálatokat és műszerezett törést is elvégeztem, akusztikus emissziós mérési módszerrel mértem a minták szakadása során lezajló mikromechanikai deformációs folyamatokat, SEM felvételek segítségével pedig megvizsgáltam a törési felületeket.

A vizsgálatokat elvégezve arra jutottam, hogy az SEBS-g-MA-val módosított kompozitok ütésállósága jobb lett, mint az SEBS-el módosított rendszereké, ugyanis segít a beágyazottabb szerkezet kialakulásának. Az erősebb kölcsönhatások miatt a PP/szizál/SEBS-g-MA rendszerekben a száltördelődés lett a domináló folyamat, amely nagyobb energiát képes elnyelni a törés során. A növekvő elasztomer tartalom ugyan növelte a kompozitok ütésállóságát, viszont a gyakorlat szempontjából ugyanolyan fontos rugalmassági modulus csökkent.

A különböző száltípusokkal töltött polimereket vizsgálva a szénszállal, de főleg az üvegszállal töltött polimerek tulajdonságai jobbak voltak, mint a PP/SEBS-g-MA/szizál kompozitok, azonban a környezettudatosság és az alacsony ár miatt a szizál szállal erősített rendszerek előnyt élvezhetnek. Másik természetes szálként len szálakat kevertem a mátrixba, amelynek az ütésállósága jobb értékeket mutatott, mint a szizálé, tehát a továbbiakban érdemes lehet foglalkozni a len szálakkal erősített kompozitok tulajdonságainak kutatásával is.

Domináns kölcsönhatások felderítése rétegszilikát nanokompozitokban

Balázs Csaba, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Pukánszky Béla** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Hegyesi Nóra** tudományos segédmunkatárs
MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Manapság az élet minden területén egyre nagyobb az igény az olcsó, de mégis jó mechanikai tulajdonságokkal rendelkező műanyagokra. Egy kémiai új polimer létrehozása és gyártási technológiájának kifejlesztése rengeteg időt és pénzt igényel, ennél gyorsabb megoldás heterogén rendszerek előállítása meglévő alapanyagokból. A nanoszilikátok ideális töltőanyagoknak ígérkeznek nagy fajlagos felületük és anizotrópiájuk miatt. A velük alkotott kompozitban az egyedi lemezek nagy felületen érintkeznek a polimer mátrixszal, ezért nagyszámú kölcsönhatás alakulhat ki, ami elengedhetetlen kedvező tulajdonságokkal rendelkező kompozit előállításához. A nagy határfelületnek köszönhetően kis mennyiségű rétegszilikát is elegendő az előnyös tulajdonságok eléréséhez [1].

Kutatómunkám célja annak felderítése, hogy milyen szerkezetet alakít ki a rétegszilikát különböző polimerekben és hogyan befolyásolja a kompozit jellemzőit a kölcsönhatás típusa. Ehhez ömledék állapotú feldolgozással Laponite kompozitokat készítettem különféle polimerekből. A Laponite egy szintetikus rétegszilikát, így pontosan definiált a szerkezete és a természetes rétegszilikátoktól eltérően nem tartalmaz fémszennyezéseket. A lapok 0,92 nm vastagsággal és ~25 nm átmérővel rendelkeznek, amelyek párhuzamosan, egymásra rendeződve helyezkednek el. A rendezett lemezekből álló nagyobb szemcsék nem tartoznának a nanométeres mérettartományba, de a feldolgozás során a szemcsék elméletileg egyedi lemezekké diszpergálhatók exfoliált szerkezetet kialakítva.

Az elkészített kompozitokból 1 mm vastag lapokat préseltem. A lemezek közötti rétegtávolságot röntgen-diffrakcióval (XRD) vizsgáltam. A kialakult szerkezetről pásztázó elektron mikroszkópia (SEM) és digitális optikai mikroszkópia (DOM) segítségével készítettünk képet. A lapokból szabványos szakító próbatesteket vágtam ki. Állandó sebességű szakító vizsgálatokat végeztem, amiből megállapítottam az egyes kompozitok modulusát, folyási feszültségét, illetve szakítószilárdságát. Ezen tulajdonságok összetétel-függésének ismerete lehetővé teszi a töltőanyag és a mátrix közötti kölcsönhatás erősségének becslését.

[1] Dominkovics, Z., Hári, J., Kovács, J., Fekete, E., Pukánszky B.: Estimation of interphase thickness and properties in PP/layered silicate nanocomposites, Eur. Polym. J. 2011, **47**, 1765-1774.

Fotokatalitikus mag-héj nanokompozitok

Kéri Orsolya, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Szilágyi Imre Miklós** tudományos munkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

A fotokatalizátorok felhasználhatóak többek között vízfertőtlenítésre, szerves szennyezők oxidálására, öntisztuló bevonatok előállítására napenergia alkalmazásával. A kristályos titán-dioxid egy fontos és széles körben alkalmazott fotokatalizátor, azonban a TiO_2 -ról közismert, hogy amorf formában nincsen fotokatalitikus aktivitása, csak kristályos anyagként. Nemrég azonban azt találták, hogy az atomi rétegleváltással (ALD) előállított amorf TiO_2 mégis mutathat valamennyi aktivitást¹. Az ALD során az egymást követő felület-kontrollált reakcióknak köszönhetően a vékonyfilmek növesztése gázfázisból nanométer pontossággal lehetséges.

A munkám során ALD-vel nanoszemcsékre leválasztott amorf és kristályos TiO_2 fotokatalitikus tulajdonságait tanulmányoztam. Referenciaként a TiO_2 mellett ALD-vel előállított fotokatalitikusan nem aktív, amorf Al_2O_3 és fotokatalitikusan aktív, kristályos ZnO bevonatot is vizsgáltam, valamint szol-gél módszerrel leválasztott TiO_2 -ot. A TiO_2 rétegek SiO_2 és PMMA (poli-(metil-metakrilát)) nanoszemcsékre lettek leválasztva. A hordozók kiválasztásánál az elsődleges szempont az volt, hogy ne legyenek hatással a TiO_2 aktivitására, ne jöjjön létre a fényindukált töltések (e^- és h^+) szétválása a rétegek között.

A körülbelül 100-150 nm átmérővel rendelkező Ströber szilika szemcsék bázis katalizált hidrolízissel lettek előállítva tetraetoxiszilánból, míg az 50-100 nm átmérőjű PMMA szemcsék emulziós polimerizációval lettek szintetizálva metil-metakrilátból. A TiO_2 ALD-vel történő leválasztása 80 °C és 300 °C-on történt, titán-izopropoxid ($\text{Ti}[\text{OCH}(\text{CH}_3)_2]_4$) és víz prekursorokból. Az Al_2O_3 trimetil-alumínium $[(\text{CH}_3)_3\text{Al}]$, a ZnO pedig dietil-cink $[(\text{CH}_3\text{-CH}_2)_2\text{Zn}]$ és víz prekursorokból lett leválasztva 80 °C és 250 °C-on is. A szol-gél módszerrel előállított TiO_2 tetra-n-butil-ortotitanát $[(\text{C}_4\text{H}_9\text{O})_4\text{Ti}]$ és etanol prekursorokból lett előállítva. Mind a tiszta SiO_2 és PMMA, mind a belőlük kapott mag-héj szerkezetű nanokompozitokat megvizsgáltam SEM-EDX, TEM, FT-IR és XRD módszerekkel. Végül a PMMA, SiO_2 , PMMA/ TiO_2 , SiO_2 / TiO_2 , SiO_2 / Al_2O_3 , SiO_2 / ZnO szemcsék fotokatalitikus aktivitását mértem meg, hogy eldönthessem, hogy az ALD-vel előállított amorf TiO_2 -nak milyenek a fotokatalitikus tulajdonságai a kristályos TiO_2 , illetve a referencia ZnO és Al_2O_3 rétegekhez képest. A fotokatalitikus reakciókat metil-narancs festék bomlásán keresztül vizsgáltam, amit UV-Vis spektrométerrel követtem nyomon.

Az ALD-vel előállított TiO_2 80 °C-on amorf, 300 °C-on pedig kristályos volt, az Al_2O_3 mind 80 °C, mind 250 °C-on amorf, míg a ZnO mindkét hőmérsékleten kristályos volt. A SiO_2 és PMMA szemcséket sikerült teljesen bevonni a leválasztott oxidokkal. A mérések eredménye szerint valóban volt fotokatalitikus hatása a SiO_2 -ra és PMMA-ra leválasztott amorf TiO_2 rétegnek, az Al_2O_3 nem volt aktív és a ZnO , valamint a szol-gél módszerrel előállított TiO_2 jó fotokatalitikus aktivitást mutatott. A fotokatalitikus aktivitást nagy mértékben befolyásolta, hogy milyen hordozóra van leválasztva az amorf TiO_2 réteg.

Irodalom:

1. Szilágyi IM, Teucher G, Harkonen E, Farm E, Hatanpaa T, Nikitin T, Khriachtchev L, Rasanen M, Ritala M, Leskela M, Programming nanostructured soft biological surfaces by atomic layer deposition, Nanotechnology 24 (2013) 245701.

Nyíltláncú telített dikarbonsav homológok diciklohexil származékainak gócképző hatása izotaktikus polipropilénben

Gombár Tibor, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd** egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A dolgozatom célja az irodalomban még nem bemutatott, olyan lineáris molekulák végükön CHA csoportokkal, köztük pedig meg a különböző hosszúságú lineáris telített parafinláncsal rendelkeznek, adalékanyagok szintézise volt, amelyek remélhetőleg gócképző hatással rendelkeznek izotaktikus polipropilénben (iPP).

Az első feladatomban az adalékanyagok szintézise volt. Az N,N'-diciklohexil-oxálamidot (DCHOxA) tetrahydrofuranban dimetil-oxalát és ciklohexil-amin felhasználásával sikerült előállítanom. Az N,N'-diciklohexil-szukcinamidot (DCHScA) és N,N'-diciklohexil-glutáramidot (DCHGlA) a megfelelő nyíltláncú telített dikarbonsav-klordiból N,N'-diciklohexil-tereftálamid.

Az elkészített adalékanyagok minősítésének első lépése volt, hogy megvizsgáltam az oldhatóságukat iPP ömledékben. Megállítható, hogy mindhárom vizsgált adalékanyag oldódik az iPP ömledékben. A DCHOxA és DCHScA oldhatósága igen jelentős mértékű a polimer ömledékben. Míg a DCHGlA kevésbé oldódik benne.

Ezt követően a különböző DCHOxA tartalmú minták kalorimetriás és optikai vizsgálatánál megállapítottam, hogy az adalék, csak igen nagy (10000 ppm) koncentrációnál fejt ki gócképző hatását. Ez alatt nem válik ki az ömledékből így nincsen gócképző hatása. Az is megállapítható, hogy a DCHOxA kiválása esetén, mind az α -, mind a β -módosulat képződését is elősegíti, úgynevezett duális gócképző.

A DCHOxA tartalmú minták mechanikai vizsgálataiból messzemenő következtetéseket egyelőre nem lehet levonni alacsonyabb koncentrációknál. A legnagyobb koncentrációnál látható, csak jelentősebb különbség, ahol valami kompozit jellegű transzkristályos szerkezet alakult ki. Ennek tudható be a folyási feszültség csökkenése és ütésállóság növekedése.

További vizsgálatokat kell még elvégezni. A DCHGlA és DCHScA kalorimetriás, optikai és mechanikai vizsgálatai is hátra vannak még.

Poli(aszparaginsav)-szilika kompozitok fejlesztése enzimek hatékony rögzítésére

Klimkó Júlia Luca, MSc II. évf.

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Szilágyi András egyetemi docens

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulensek: **Molnárné Krisch Enikő** PhD hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Weiser Diána PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Napjaink vegyiparában egyre inkább előtérbe kerülnek az olyan környezetbarát szintézisek, amelyekben enzimeket alkalmaznak. Az enzimek már fiziológiai körülmények között képesek katalizálni a kívánt folyamatot, alkalmazásukkal a reakcióidő csökkenthető és elkerülhető a nem kívánt optikai izomerek képződése. Azonban az enzimek érzékenyek lehetnek a szélsőséges környezeti paraméterekre (pl.: pH, a hőmérséklet) és a mechanikai igénybevételre. Emellett sokszor nehezen nyerhetők vissza a reakcióelegyből, a keletkezett terméktől nem választhatók el. A hátrányok kiküszöbölésére megoldást jelenthet, ha az enzimet rögzített formában alkalmazzuk.

TDK munkám célja egy olyan enzimhordozó rendszer kifejlesztése volt, amely képes a szilárd hordozón történő egyszerű adszorpció és a polimer mátrixba ágyazás előnyeit ötvözni. Ez az enzimet stabilan rögzíti és könnyen hozzáférhetővé teszi a szubsztrát számára; valamint a rögzített enzim biokatalitikus aktivitása és stabilitása jó. A polimer mátrix alapjául a poli(aszparaginsav)-at (PASP) választottam, hiszen ez a szintetikus poliaminosav biológiailag lebontható, valamint költséghatékonyan és jól definiált molekulatömeggel állítható elő. A PASP anhidridje, a poliszukcinimid könnyen reakcióba vihető primer aminokkal, így enyhe hidrolízist követően különböző PASP származékok állíthatók elő.

Az általam kifejlesztett enzimhordozó rendszert az ipari és gyógyászati szempontból is fontos *Candida antarctica* Lipase B (CaLB) enzimmel teszteltem. A kísérletek során az előzőleg szilikagél hordozóra adszorpcióval rögzített *Candida antarctica* Lipase B (CaLB) enzimet tiol-csoportokkal módosított poliaszparaginsav-alginát polimer mátrixba ágyaztam, majd biszepoxi keresztkötők alkalmazásával kémiai rögzítettem. Munkám során vizsgáltam az alkalmazott mátrix összetételének hatását az enzimmészítmények biokatalitikus működésére és stabilitására.

Biodegradálható polimer keverékek

Csoknyay Tamás, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Vargha Viktória** ny. tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A TDK dolgozat biodegradálható polimer blendek előállításával, és ezek műszeres, illetve nem műszeres vizsgálataival foglalkozik. Célunk hosszabb távon komposztálható polimer keverékek előállítása, jellemzése, és összehasonlítása volt, melyek a komposztálhatóság előnyös tulajdonságán kívül árban nem túlságosan drágák, és mechanikai, valamint termikus tulajdonságokban nem túlságosan maradnak el a kereskedelemben használt polimerektől. Ezekből a keverékekből elsősorban csomagolóanyagokat, vagy mezőgazdasági fóliát, esetleg fröccsöntött termékeket állíttatnánk elő a jövőben. A dolgozat a hőre lágyuló keményítőt (TPS-t) tartalmazó keverékekre fókuszál. Leírjuk benne ennek az anyagnak az előállítási körülményeit, valamint más biopolimerekhez való keverésének menetét, és körülményeit. A keverékekből, és a tiszta anyagokból készült lapokat komposztba helyeztettük 6 hétre, majd a kivétel után meghatároztuk a lap tömegének változását, szerkezeti változásait Fourier-transzformációs infravörös (FT-IR) spektroszkópiai mérésekkel vizsgáltuk. Mivel a komposztálás során egy keveréken - a polikaprolakton – hőre lágyuló keményítő (PCL-TPS) keveréken - kívül a többi keverék elveszett, e keverék összeférhetőségének vizsgálatát kezdtük el mechanikai mérésekkel. Ezen kívül elkezdtük az anyagok termikus vizsgálatait differenciális pásztázó kaloriméter (DSC) segítségével. A komposztálás során a tömegek csökkenése biztató szinte minden minta esetén, az FT-IR spektrumok segítségével pedig néhány anyag esetén jelentős szerkezeti változásokat mutattunk ki. Az összeférhetőség vizsgálatára irányuló mechanikai mérésekből egyelőre sok következtetést nem tudunk levonni, de a jövőben tervbe van véve a keverék további összeférhetőséggel kapcsolatos vizsgálata, és esetlegesen új keverékek előállítása, azok vizsgálata, és összehasonlítása a PCL-TPS keverékkel.

Innovatív talajjavítás bioszénnel - laboratóriumtól a szabadföldi alkalmazásig

Bacsárdi Szilvia, BSc. IV. évf.

Máté Rózsa, MSc II. évf.

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Dr. Feigl Viktória egyetemi tanársegéd

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Konzulensek: **Dr. Rékási Márk** osztályvezető

MTA ATK TAKI Agrokémiai és Növénytaplálási Osztály

Farkas Éva PhD hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A "Zöld Ipari Innováció Program" keretében megvalósuló, "Talajoltóanyag és bioszén kombinált alkalmazása leromlott talajokra" c. pályázathoz kapcsolódó TDK dolgozatunk témája a környezeti kockázatmenedzsment két kiemelt jelentőségű problémakörére épül talajjavítás (talajvédelem) és hulladékhasznosítás.

Magyarországon a savanyú és homoktalajok jellemző talajtípusként vannak jelen, a leromlott, javítandó talajok közé soroljuk ezeket. Ugyanakkor javításuk hosszútávon, jó hatásfokkal nem érhető el. A különböző szerves hulladékból pirolízissel előállított bioszének alkalmazása környezetvédelmi technológiákban egyre jelentősebb kutatási téma. A talajra alkalmazott bioszén porózus szerkezetének köszönhetően nagy felületet biztosít, javíthatja a leromlott talajok szerkezetét, víztartóképességét, valamint a tápanyaghasznosítást. Azonban kevés átfogó tanulmány készült a bioszének kedvező hatásáról leromlott savanyú homoktalajokon alkalmazva.

Technológiafejlesztést célzó többlépcsős kutatási munkánk lefedi az innovációs láncot: a különböző bioszén termékek tesztelésétől, az azt követő laboratóriumi alkalmazáson át az első szabadföldi demonstrációig a komplex technológia értékelésig bezárólag.

Kísérleteink első fázisában 13 különböző eredetű, eltérő pirolízis technikával előállított bioszén terméket teszteltünk a technológiai szempontból megfelelő bioszének kiszűrésére és további kísérletekhez történő kiválasztására. A léptéknövelés következő lépcsőjében, laboratóriumi mikrokozmosz kísérletekben három kiválasztott bioszén termék hatását tanulmányoztuk Nyírlugosról származó savanyú homoktalajon, különböző dózisokban, műtrágyával és komposzttal kombinálva. A kísérletek monitorozására integrált fizikai-kémiai, biológiai és ökotoxikológiai módszereket magában foglaló metodikát alkalmaztunk.

A kísérletek fő célja a bioszén-típusok talajjavításra történő felhasználhatóságának és hatékonyságának vizsgálata, valamint a szabadföldi alkalmazás megalapozása volt. A laboratóriumi technológiai kísérletek léptéknövelt folytatásaként került sor a kiválasztott bioszén alkalmazására szabadföldön, savanyú homoktalajon. A nyírlugosi modellterületen, kisparcellás kísérletekben monitorozzuk és értékeljük a bioszén hatását, mind a talaj- mind a tesztnövényként alkalmazott kukorica jellemzőinek vizsgálatával.

Uracil-DNS genommal rendelkező bakteriofág túlélési stratégiájának vizsgálata

Bertalan Éva Ágnes, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Vértessy G. Beáta** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék
MTA TTK Enzimológiai Intézet

Konzulens: **Nagy Kinga** PhD hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Michael Skurnik és kollégái 2005-ben felfedeztek egy Φ R1-37 nevű, *Yersinia enterocolitica* baktériumot fertőző új fágot, amely DNS-e uracilt tartalmaz timin helyett. Egészen idáig csupán a *Bacillus subtilis*-t fertőző PBS fágról írták le az irodalomban, hogy szintén uracilos genommal rendelkezik.

Ezen fágok átlagos nukleotid készletű baktériumokat fertőznek, melyek enzimszere az uracilt egy, a DNS-ben előforduló hibaként értelmezi és azt onnan eliminálni igyekszik. Ezen enzimek közé tartozik pl.: az uracil-N-glikoziláz (UNG), illetve egyes nukleotid anyagcsere enzimek pl.: a dUTPáz, amely preventív védelmet biztosít az uracil DNS-be kerülésének elkerülése érdekében.

Ilyen körülmények között feltételezhetően a fággenomnak kódolnia kell olyan fehérjéket, melyek ezen enzimekkel kölcsönhatásba lépve, befolyásolják azok működését, lehetővé téve a sikeres vírusfertőzést. Az első uracil-DNS-glikoziláz inhibitor (UGI) a PBS-ben találták meg, amely segítségével a vírus számára lehetségessé válik, hogy elkerülje magas uraciltartalmú DNS-ének feldarabolását. Mivel az UNG gátlása még önmagában nem elegendő az uracilos genom kialakulásához (csupán annak lebomlását gátolja) szükség van olyan mechanizmusokra is melyek ezt lehetővé teszik pl.: a sejtbeli uracil szint csökkentésért felelős enzimek működését gátolják.

A kutatási munkám célja ezen uracilos genomú fágok túlélési stratégiájának vizsgálata, valamint enzimaktivitást befolyásoló molekulák keresése fehérjékkel történő, illetve sejtes kísérletek segítségével a Φ R1-37 fág által fertőzött *Yersinia enterocolitica* dUTPáz, timidilát szintáz és uracil-DNS-glikoziláz enzimjeit illetve a fág genomiális könyvtárát felhasználva.

A mezo-tetrakisz(4-N-metilpiridil)porfirin hatása a DNS-molekula szerkezeti és nanomechanikai tulajdonságaira

Supala Eszter, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Kellermayer Miklós** egyetemi tanár
SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

Konzulens: **Dr. Sveiczter Ákos** egyetemi docens
BME VBK Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A porfirinek a fotodinámiás terápiák során széles körben alkalmazott fényérzékenyítő vegyületek. Az eljárás folyamán a szert a szervezetbe juttatják, majd nagy hullámhosszúságú, kis energiájú látható fénnel sugározzák be a kezelni kívánt területet. A molekula gerjesztett állapotba kerül, amelyből úgy jut vissza alapállapotba, hogy energiáját átadja a jelen lévő oxigénnek vagy annak származékainak. A folyamat eredményeként szabadgyökök és szinglet oxigén keletkezik, amelyek oxidálják a sejtekben található fehérjéket, nukleinsavakat és lipideket, és ezzel sejthalált okoznak. Mivel a felfokozott anyagcsere miatt a fényérzékenyítő vegyületek jellemzően a daganatos sejtekben és gyulladásos szövetekben szaporodnak fel, továbbá az eljárás lokálisan is alkalmazható, a terápia alkalmas tumoros megbetegedések és bakteriális fertőzések kezelésére, valamint vírusok inaktiválására.

Az általam modell porfirin molekulaként alkalmazott mezo-tetrakisz(4-N-metilpiridil)porfirin (TmPyP) a DNS-molekulába interkalálva és a kisértékekbe kötve megváltoztatja annak fizikai és kémiai tulajdonságait. Így vélhetően egy másik, eddig pontosan nem ismert mechanizmuson keresztül is hat. E hatás részleteinek felderítése közelebb vihet minket a vegyület hatásmechanizmusának megértéséhez.

Munkám célja az volt, hogy megállapítsam, hogy a TmPyP a DNS-hez kötődve megváltoztatja-e annak globális szerkezeti és nanomechanikai tulajdonságait. A kísérletek során ötféle hosszúságú DNS-szekvenciát vizsgáltam, amelyekből négyet úgy állítottam elő, hogy a leghosszabb szálát emésztettem restriktív enzimekkel. Ezekről a kontroll mintákról, illetve az ezekhez telítési koncentrációban hozzáadott TmPyP-t tartalmazó komplexekről készítettem nagy felbontású képeket atomerő mikroszkóppal. A felvételekről minden mérési ponton 1000-1000 molekulát választottam ki, és lemértem a kontúrhosszukat, illetve a vég-vég távolságukat. Ezekből az adatokból függvény-illesztéssel megkaptam a kontroll és a kezelt DNS-szálak hajlítási merevségét jellemző perzisztencia hosszakat. A kezelés hatására a paraméterekben bekövetkező változást statisztikai próba segítségével vizsgáltam.

Autofágiát indukáló hatóanyagok életképesség-növelő hatásának vizsgálata celluláris stressz esetén

Babos Kitti, MSc II. évf.

Témavezetők: **Dr. Kapuy Orsolya** egyetemi adjunktus

SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet

Zámbó Veronika PhD hallgató

SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet

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

BME Biotechnológiai Intézet

A sejtes rendszerek egyik fontos tulajdonsága a különböző ingerekre adott válaszadás, a belső állandóság fenntartása érdekében. Az említett behatások igen sokfélék lehetnek: tápanyaghiány, vírusfertőzés, lipidek nem megfelelő helyen való jelenléte, stb.

Munkám során az endoplazmás retikulumot (ER) érintő stresszhatásokkal foglalkoztam. Mivel az ER létfontosságú sejtalkotó, működésének zavara végzetes következményekkel járhat. Fő funkciói között szerepel a fehérjék feltekeredése (folding) és módosítása. Ha stressz éri, akkori, rosszul feltekeredett (misfolding), vagy feltekeredetlen (unfolding) fehérjék keletkezhetnek és akumulálódhatnak a lumenében. Ennek elhárítására az endoplazmás retikulum az UPR (unfolded protein response) elindításával reagál, mely első lépésben autofágia-függő önmérsztést, mint túlélést segítő folyamatot indukál, ám eredménytelen helyreállítás esetén apoptotikus sejthalálhoz vezet. Eddigi tanulmányokban bizonyították, hogy különböző stresszorok együttes alkalmazása növelheti a sejtek életképességét, túlélési esélyeit. Ez azt jelenti a gyakorlatban, hogy autofágiát indukáló anyaggal történő előkezelés után a sejtek képesek lehetnek késleltetni és/vagy kivédeni az apoptózist okozó stresszorok hatását.

TDK dolgozatom elkészítése során ilyen, potenciálisan túlélést segítő hatóanyagokat teszteltem humán sejtvonalon (HEK293). A használt hatóanyagok egy része már vizsgálva volt ER stresszben (pl. Metformin, Resveratrol), az EGCG és a BG15 használata azonban újdonságnak tekinthető ebben a témában.

Elsőként beállítottam a vizsgálni kívánt hatóanyagok megfelelő kezelési idejét és koncentrációját. Ezt követően a kapott paramétereknek megfelelően előkezeltem a sejteket, majd az apoptózist indukáló thapsigargin (ER stresszor) vagy palmitátot (lipotoxicitást kiváltó) adtam hozzájuk. Eredményeim arra engednek következtetni, hogy az általam vizsgált autofágia induktorok többsége képes arra, hogy a sejthalált késleltesse. Ennek megerősítése életképességi vizsgálatot végeztem és a kulcs fehérjemarkereket fehérjeszinten is nyomon követtem.

**Új fluoreszcens esszé kidolgozása a gyógyszer farmakológiában fontos
humán Organikus Anion Transzporter Polipeptidek aktivitásának
vizsgálatára**

Székely Virág, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Laczka Csilla** tudományos munkatárs

MTA TTK Enzimológiai Intézet, Membránfehérje Kutatócsoport

Konzulens: **Patik Izabel** PhD hallgató

MTA TTK Enzimológiai Intézet, Membránfehérje Kutatócsoport

Az Organikus Anion Transzporter Polipeptidek (OATP-k) olyan membránfehérjék, amelyek nagyméretű szerves molekulák sejtekbe történő felvételét segítik elő. Tizenegy humán OATP-t ismerünk, amelyek az emberi test számos szövetében expresszálódnak. Munkám során az OATP1B1, 1B3 és 2B1 fehérjékkel foglalkoztam. Ezek közül az OATP1B1 és 1B3 máj-specifikusan termelődnek, az OATP2B1 pedig kifejeződik a májban, a vékonybélben, a vér-agy gátban, a méhlepényben, a szívben és a vázizomban. Mindhárom fehérje szállít epesókat és nemi hormonokat. Ezen kívül számos, a klinikumban használt gyógyszer molekulával (például antivirális és kemoterápiás szerek, sztatinok) is kölcsönhatásba lépnek, ezért mutációik, polimorfizmusaik igazoltan eltérő gyógyszer farmakokinetikát eredményeznek. Ezen kívül OATP1B vagy 2B1 szubsztrátok egyidejű alkalmazásakor nem várt toxicitás léphet fel. Nagy igény van tehát gyógyszer molekulák és az OATP1B és 2B1 fehérjék kölcsönhatásának vizsgálatára.

Munkám során az említett 3 fehérje és egy általunk újonnan felfedezett fluoreszcens OATP szubsztrát kapcsolatát jellemeztem. A festék transzportját áramlási citometriával vizsgáltam OATP1B1, 1B3 illetve 2B1 fehérjéket termelő Sf9 (*Spodoptera frugiperda*) rovarsejteken. Ezt követően az új funkcionális esszét emlős sejtek használatával fluoriméterre adaptáltam, amely lehetővé tette a módszer automatizálását. A kidolgozott esszé felhasználható molekula könyvtárak szűrésére, ezért ígéretes eszköze lehet a jövőben a farmakológiai kutatásoknak.

A Syk kináz szerepe a cerebrális iszkémia során kialakuló gyulladásos folyamatokban

Császár Eszter, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Dénes Ádám** tudományos főmunkatárs

MTA KOKI Neuroimmunológia kutatócsoport

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

BME Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Napjainkban a stroke az egyik leggyakoribb halálozási ok és vezető tényező a maradandó rokkantság kialakulásában. A stroke során fellépő vér-agy gát sérülés következtében immunsejtek (makrofágok, T sejtek, B sejtek, leukociták) áramlanak be a sérülés helyére, ahol gyulladást okoznak. Az immunsejtek ezáltal közvetlenül hozzájárulnak az iszkémiás agyi károsodás kialakulásához, ami az agyi sérülést súlyosbítva jelentősen rontja a betegség kimenetelét.

Az irodalomból ismert, hogy a főként haematopoetikus rendszerben expresszálandó Syk kináz (Spleen tyrosine kinase) fontos szerepet játszik az immunsejtek aktiválásában. Az iszkémiás területre infiltrálódó perifériás immunsejtek pedig jelentősen fokozzák az agyi károsodás mértékét. Célul tűztük ki a Syk kináz stroke okozta iszkémiás károsodás kialakulásában betöltött szerepének vizsgálatát.

Munkánk során *in vivo* műtéti és hisztológiai módszereket alkalmaztunk. Az artéria cerebri media okklúziójával *in vivo* fokális cerebrális iszkémiát indukáltunk a Syk kináz csontvelői eredetű sejtekben nem termelő (Syk knock out) és vad típusú kísérleti állatokban. Ezt követően szövettani metszeteken krezil-ibolya festés segítségével meghatároztuk az infarktus és ödéma méretét, az elpusztult idegsejtek számát, illetve IgG immunfestéssel a vér-agy gát sérülés mértékét. Immunhisztokémiát alkalmazva vizsgáltuk továbbá a mikroglia aktiváció mértékét és az infiltrálódó leukociták számát.

Megvizsgáltuk továbbá, hogy a haematopoetikus Syk KO állatokban tapasztalt változásokért vérlemezke-eredetű folyamatok felelősek-e. Ezért olyan egereket is előállítottunk, melyekben a Syk kináz specifikusan csak a vérlemezkékben inaktivált, majd az agyi infarktus méretének és a neurológiai károsodás mértékének megállapítására végeztünk vizsgálatokat.

Megfigyeléseinkből arra következtethetünk, hogy a haematopoetikus rendszerben expresszálandó Syk kináz a cerebrális iszkémia szempontjából valószínűleg protektív szerepű. Eredményeink egyben megerősítik a perifériás eredetű immunsejtek hozzájárulását az iszkémiás agyi károsodás kialakulásához. Mivel a Syk kináz által közvetített folyamatok pontos mechanizmusa még nem tisztázott, a megértéshez további vizsgálatok elvégzését tervezzük.

Tau aggregációt gátló kismolekulájú vegyületek tesztelése *Drosophila melanogaster* neurodegeneratív betegség modelleken

Rubics András, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Kárpáti Manuéla** egyetemi tanársegéd

MTA-TTK Neurodegeneratív Betegségek Gyógyszerkutató Csoport

Évről-évre egyre több embert diagnosztizálnak Alzheimer-kórral és más demenciákkal, így egyre sürgetőbbé válik hatékony gyógyszerek kifejlesztése, melyek a mai napig nem elérhetőek. A neurodegeneratív betegségek egy része összefüggésbe hozható a Tau fehérje aggregációjával, ezeket taupátiáknak nevezzük. A Tau egy mikrotubulusokat stabilizáló protein, melynek kötődése a fehérje foszforilált állapotban kötődik a mikrotubulusokhoz, foszforilált állapotban leválik róluk. Kóros esetben a hiperfoszforilált fehérjék mennyisége jelentősen megemelkedik, ennek következtében előbb Tau oligomerek, végül oldhatatlan aggregátumok képződése figyelhető meg.

Munkánk során az ecetmuslicát (*Drosophila melanogaster*) használtuk genetikai modellként, melyben a humán Tau fehérje túltermelésével létrehoztunk több, az emberi taupátiáknak megfelelő kórképet. Különböző típusú idegsejtekben kifejeztetve a Tau más-más tüneteket hoz létre. Dopaminerg neuronokban expresszáva jelentős élethossz csökkenés figyelhető meg, míg motoneuronokban a motoros funkciók romlását eredményezi. A Tau az összetett szemben kifejezve károsítja annak szerkezetét és fenotípusos elváltozást okoz. A felállított modelleket kezeltük két, a csoportunk által tervezett gyógyszer-jelölt kismolekulával, melyek a Tau fehérje aggregációját gátolják. A muslica modellekben a kezelés hatására szignifikáns javulást tapasztaltunk a vizsgált motoros funkciókban és a szem szerkezetében.

A Gadd34 fehérje és az mTOR útvonal kapcsolatának vizsgálata endoplazmás retikulum stressz esetén

Holczer Marianna, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Kapuy Orsolya** egyetemi adjunktus

SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Az eukarióta sejtek legfontosabb feladata a genetikai integritásuk megőrzése. A rosszul feltekeredett fehérjék felhalmozódása az endoplazmás retikulumban (ER) aktiválja a „rosszul feltekeredett fehérje választ” (UPR = unfolded protein response). Az UPR elsődleges célja a sejt állapotának a korábbi vagy egy új homeosztatisz állapotba történő visszaállítása egy autofágia-függő önmegsejtés által, míg a túlzott stressz apoptotikus sejthalált indukál. A sejtnövekedés fő szabályozójának az mTOR-nak (mammalian target of rapamycin) az UPR-rel kölcsönhatásban pro-apoptotikus szerepe van. Az UPR és az mTOR közötti kapcsolat már bizonyított, de hogy ezek az utak hogyan befolyásolják az élet-halál közti döntés dinamikáját, még ismeretlen.

A kísérletek során célul tűztük ki az UPR-indukált Gadd34 szerepének a megértését az UPR-mTOR útvonalak keresztkapcsolatában ER stressz során. Ezt a kérdést különböző molekuláris biológiai eszközök segítségével vizsgáltuk. Kísérleteinkhez humán sejtvonalat (HEK293) kezeltünk ER stresszszorral (thapsigargin), mTOR gátlószerekkel (rapamycin) vagy autofágia inaktívátorral (3-metiladenin).

Vizsgálataink megerősítették, hogy az mTOR gátlása (autofágia aktiválása) ER stressz esetén növelte a sejtek életképességét az autofágia indukciója által. Azt vettük észre, hogy a Gadd34, amely az egyik kulcseleme az UPR útvonalnak, képes rá, hogy pozitívan hasson a sejtek túlélésére ER stressz esetén. Elképzelésünk szerint az mTOR és az UPR szinergizmusa, a túlélést segítő autofágia és a sejthalált indukáló apoptózis közötti döntésben keresztkapcsolati szabályozó elemekkel és visszacsatolási hurkokkal valósul meg ER stressz hatására.

A dUTPáz és az Stl inhibitor fehérje kölcsönhatásának összehasonlító vizsgálata eukarióta és prokarióta enzimmodellen

Pölöskei István, BSc IV. évf.

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

MTA-TTK Enzimológiai Intézet

Benedek András PhD hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A dUTPáz enzim a megfelelően alacsony dUTP/dTTP arány biztosításán keresztül központi szerepet tölt be a DNS épségének megőrzésében. Specifikus gátlásának lehetősége számos kutatás tárgyát képezi több elképzelhető terápiás vonatkozás miatt. Gyógyszercélpontnak ígérkezik például a tuberkulózis, a malária és bizonyos daganattípusok elleni küzdelemben is. Az utóbbi évek felfedezése, hogy a *Staphylococcus aureus* $\Phi 11$ helper fágjának dUTPáza képes kölcsönhatni a *Staphylococcus aureus* patogenitási szigetek kifejeződését gátló Stl represszor fehérjével, elindítva ezzel a virulencia faktorok átírását és horizontális átvitelét. A kutatócsoportunkban elvégzett részletesebb kinetikai vizsgálatok során igazolódott, hogy a $\Phi 11$ dUTPáz és az Stl fehérje közötti kölcsönhatás a dUTPáz aktivitás reverzibilis gátlásával jár. Fény derült továbbá arra is, hogy az Stl képes a *Mycobacterium tuberculosis* (MTB) dUTPázával is komplex létrehozására és aktivitásának markáns gátlására.

Felvetődik a kérdés, hogy tekinthető-e az Stl fehérje univerzális dUTPáz inhibitornak. Bár a homotrimer szerkezetű dUTPázokra az aktív hely felépítését tekintve nagy fokú konzerváltság jellemző, a dUTPázok között fennállnak fajspecifikus eltérések. Jellegzetes különbség mutatkozik a prokarióta és eukarióta dUTPázok között a trimer kölcsönhatási felületen formálódó központi csatorna polaritásában, ami befolyásolhatja az Stl-lel való kölcsönhatást. Céлом az eukarióta modellszervezetként használt ecetmuslica (*Drosophila melanogaster*) és a prokarióta modellszervezetként használt *Escherichia coli* dUTPáz enzim és az Stl fehérje kölcsönhatásának *in vitro* vizsgálata, majd a prokarióta és az eukarióta modell dUTPázzal kapott eredmények összehasonlító értékelése.

Kutatómunkám során a molekuláris biológia eszközeit felhasználva előállítottam az *in vitro* vizsgálatokhoz a fehérjéket. Az enzimaktivitás gátlás összehasonlítását követően a komplexképződés létrejöttét igazoltam termofluorimetriás méréssel és natív gélelektroforézissel, majd elektroforetikus mobilitás eltolódás mérést (EMSA) végeztem annak megállapítására, hogy a dUTPáz és az Stl kölcsönhatása előidézi-e a SaPIbov1 DNS szakaszról a represszor (Stl) leszorítását. Munkám végső fázisában a BME VBK Biostruct laborban végeztem kristályosítási kísérleteket. Eredményeim arra utalnak, hogy a prokarióta *E. coli* dUTPáz aktivitását az Stl fehérje nem gátolja, mégis feltételezhető közöttük valamilyen mértékű kölcsönhatás kialakulása. Az eukarióta *D. melanogaster* dUTPáz aktivitását ugyanakkor jelentősen gátolja a vizsgált fehérje inhibitor. Az eltérés pontos szerkezeti hátterére a fehérje komplexek kristályosítási kísérletei adhatnak majd magyarázatot.

Vírusdetektálás aptamerekkel

Percze Krisztina, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Mészáros Tamás** egyetemi docens

SE Orvosi Vegytani, Molekuláris biológiai és Patobiokémiai Intézet

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A humán vírusok azonosítását és diagnosztizálását nagyban megnehezíti a vírusok gyors mutációja, ezért különösen fontos olyan vírusdiagnosztikai módszerek fejlesztése, melyek fel tudják venni a versenyt a vírusok evolúciós sebességével. A jelenleg alkalmazott direkt vírusdetektálási módszerek közé tartozik a víruskultúrák izolálása és kitenyésztése, mely időigényes, a valós idejű PCR, mely magas költségekkel jár és az antitest alapú módszerek, melyek alkalmazásának határt szab a nagy szelektivitású antitestek előállításának összetettsége. Az utóbbi módszer hiányosságaira nyújthat megoldást az aptamerek használata.

Az aptamerek 20-80 nukleotid hosszú, egyszálú oligonukleotidok, melyek képesek célmolekuláikat nagy affinitással és specifitással felismerni, előállításuk in vitro szelekcióval történik, melynek körülményei igény szerint megválaszthatók. Továbbá az aptamer szelekció gyorsasága lehetőséget teremt a mutációk következtében újonnan megjelenő vírusokkal lépést tartó diagnosztikai módszerek fejlesztésére.

Kutatásunk célja olyan aptamerek szelektálása volt, melyek alkalmasak a szezonális felső légúti megbetegedésekért felelős RS vírus specifikus felismerésére és megkülönböztetésére a Rhinovírus fertőzéstől, mely a jelenlegi orvosi gyakorlatban az RS vírus fertőzéstől a tünetek alapján megkülönböztethetetlen. Többféle metodikai megközelítéssel igazoltuk, hogy a szelektált aptamerek kiválóan alkalmasak az RS vírus detektálására akár olyan komplex biológiai mintában is, mint a garatkenet. Mindezek alapján aptamereink receptorként szolgálhatnak az RS vírusfertőzés gyors és költséghatékony diagnosztikájában.

A PERK célgénének szerepének átfogó vizsgálata endoplazmás retikulum stressz esetén

Márton Margita Ágnes, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Kapuy Orsolya** egyetemi adjunktus

SE Orvosi Vegytani, Molekuláris biológiai és Patobiokémiai Intézet

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Az élő szervezetek egyik legfontosabb feladata fenntartani belső homeosztázisukat a külső behatásokkal szemben. Az endoplazmatikus retikulum (ER) egy eukarióta sejtalkotó, mely többek között felelős a szekréciós és membránfehérjék keletkezése és megsemmisítése közötti pontos egyensúlyért. A különféle ER stressz hatásokra felhalmozódó fehérjék aktiválják a „sejt-fehérje-válasz” (Unfolded Protein Response: UPR) jelátviteli útvonalát. Az UPR-nek három ága van, melyeket az IRE1, a PERK és az ATF6 transzmembrán fehérjék szabályoznak. Az UPR elsődleges szerepe lecsökkenteni a stressz okozta károsodásokat, és visszaállítani a sejt egyensúlyát, vagy egy új egyensúlyi állapotot létrehozni az önmérsztő autofágia segítségével. Túlzott mértékű vagy idejű ER stressz apoptotikus sejthalált okoz. Kísérletes eredmények szerint az ER stressz szoros kapcsolatban áll különböző genetikai és degeneratív megbetegedésekkel (pl. Alzheimer-kór, Parkinson-kór), amely az UPR jelátviteli útvonal vizsgálatának orvosi jelentőséget ad.

Célunk az volt, hogy molekuláris biológiai módszerek segítségével, egy minőségi leírást adjunk a rendszerről, amely a sejten belüli élet és halál közti döntést meghozója ER stressz esetén. Kiemelten vizsgáltuk az UPR PERK és IRE1 útvonalait.

A kutatásunk eredményei alátámasztották azt, hogy ER stressz esetén először mindig a túlélést segítő autofágia indukálódik, és csak azt követően kapcsol be az apoptózis. Azonban még nem ismert annak módja, hogyan képes ugyanazon PERK útvonal ezeket a folyamatokat együttesen irányítani. Megállapítottunk egy alacsony és magas ER stressz szintet, és ehhez sikeresen kötöttünk PERK célgéneket. Az eredmények azt mutatják, hogy nemcsak IRE1 célgénjeire igaz, de a PERK útvonal elemei között is van olyan, amely már korábban, a túlélési folyamattal együtt aktiválódik, míg bizonyosak csak az apoptózis bekapcsolásakor válnak aktívvá. Elképzelésünk szerint a szabályozási hálózat dinamikai viselkedésében meghatározó, hogy a két látszólag különböző mechanizmust (túlélés vagy sejthalál) irányító UPR fehérjék között keresztkapcsolatok, pozitív és negatív visszacsatolási hurkok legyenek.

Aptamer szelekció *in vitro* transzlált humán miokardiális prohormonra

Harkai Ákos, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Mészáros Tamás** egyetemi docens
SE Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet

Konzulens: **Dr. Sveiczzer Ákos** egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A szívelégtelenség szerteágazó kivizsgálásában az egyszerű laboratóriumi paramétereken túlmenően többféle biomarkert igyekeznek használni a klinikai kémiai gyakorlatban. Jelenleg a nátriuretikus peptidekkel van a legtöbb tapasztalat. A nátriuretikus peptideknek több típusa is ismeretes, amelyek főleg nátriumion-, és vízűritő hatásuk révén befolyásolják a szervezet elektrolit háztartását, annak finomszabályozásában vesznek részt. Számos klinikai tanulmány igazolta már, hogy a B-típusú nátriuretikus peptidhormon több formája a vérben szignifikánsan magasabb koncentrációban van jelen a különböző akut és krónikus szívelégtelenségben szenvedők esetében.

A gyorsan fejlődő molekuláris biológiai módszerek közül egyre több már az egészségügyi rutinvizsgálatok részévé vált. A XX. század utolsó éveiben sikerült először a molekuláris darwinizmus elméletét (*Systematic Evolution of Ligands by EXponential enrichment*) alkalmazva szintetikus oligonukleotid alapú, fehérjére szelektív aptamereket létrehozni. A célmolekulára specifikus konformációt felvevő aptamer molekula kellően alacsony disszociációs állandóval képes kötődni, ezzel lehetővé téve a szelektív, pontos és gyors kimutatást. Amennyiben a célmolekula egy, a humán keringésben kis koncentrációban jelenlévő fehérje, esetleg hormon, elgondolkodtató feladat annak megfelelő mennyiségben, stabil, ám mégis natív, nagy tisztaságú formában való kinyerése. Ilyen esetekben az adott fehérje előállítására *in vitro* transzlációval célravezető megoldás lehet, hiszen ezzel a módszerrel az említett kívánalmaknak eleget tehetünk.

Az Egészségügyi Világszervezet (WHO) 2012-es felmérése szerint a tíz vezető halálok között szerepel az iszkémiás és a magas vérnyomással járó szívbetegség is. Ezen adatok tudatában indokolt olyan újfajta, aptamereken alapuló diagnosztikai eljárások fejlesztése, amelyek hozzájárulhatnak a kóros elváltozások korai felismeréséhez, a betegség súlyosságának megítéléséhez, illetve a kezelés eredményességének ellenőrzéséhez.

Munkám célja a humán keringésben megjelenő proBNP-re specifikus aptamerek szelektálása. Ennek megvalósításához sejtmentes transzlációs rendszerben a célmolekula előállítására, majd egy többciklusos folyamatban – különböző módon változtatva a szelekciós nyomást – az aspecifikus aptamerek kiválogatására van szükség. Végül a potenciálisan specifikus aptamerek elsődleges és másodlagos szerkezetét *in silico* módszerekkel vizsgálom meg.

Kölcsönható szerkezeti elemek és kölcsönhatási felszín azonosítása egy fehérje-fehérje interakción alapuló molekuláris kapcsoló esetén

Matejka Judit, BSc IV. évf.

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

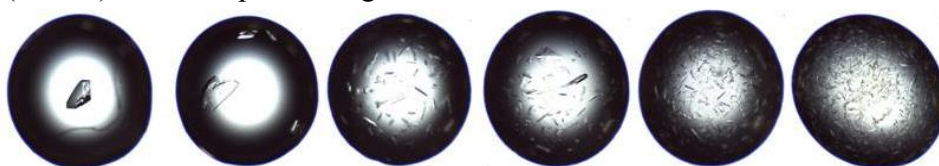
Konzulens: **Nyíri Kinga** tudományos segédmunkatárs

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Munkám során a *Staphylococcus aureus*-ban található mozgó genetikai elemek terjedését szabályozó molekuláris kapcsolót alkotó fehérjék (Stl illetve egy fág eredetű dUTPáz) kölcsönható szerkezeti elemeit vizsgáltam. Az Stl a DNS-hez kötve gátolja a patogénitási szigetek kifejeződését (represszió), a dUTPázzal való kölcsönhatás következtében ez a fehérje-DNS komplex felbomlik (derepresszió).

Céлом az Stl és a dUTPáz közötti kölcsönható felszínek és ezáltal a patogénitási szigetek szabályozásában fontos szerepet játszó szerkezeti elemek azonosítása volt. Ennek alapján a jövőben lehetőség nyílhat a mozgó genetikai elemek által hordozott virulencia faktorok különböző *Staphylococcus aureus* törzsek közötti terjedésének megakadályozására.

Elsőként olyan dUTPáz fehérjéket vizsgáltam, melyekből egyes szerkezeti motívumok törlésre kerültek: az egyik a fágokra jellemző specifikus inszertet (dLoop), a másik a vad típusú fehérje flexibilis C-terminális karján található V. konzervált motívumot nem tartalmazta (dKar). Korábbi vizsgálatok alapján mindkettő kötődik az Stl-hez, azonban a dLoop mutáns fehérje a dKar fehérjével ellentétben nem mutat a vad típusúval megegyező viselkedést. A két fehérje kristályosításával és a kristályok röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatával szeretnék magyarázatot találni a tapasztalt különbségre. Ennek érdekében többféle körülményben kristályosítottam a fehérjéket és az oldatösszetétel optimalizálását követően a kapott makroszkópikus kristályok (1. ábra) szórási képét is vizsgáltam.



1. ábra A dLoop fehérje kristályai

Emellett a fehérje-fehérje kölcsönható felszín azonosítása érdekében keresztkötési kísérleteket végeztem, melyek a monomer és dimer állapotban is előforduló Stl fehérje oligomerizációban résztvevő, illetve a dUTPáz enzimmel kölcsönható felszínéről is információt nyújthatnak. Az egyedi fehérjék esetében a keresztkötési reakció során többségében kovalensen kötött dimer Stl, trimer dUTPáz, míg a fehérjék keveréke esetében kovalensen kötött komplex termékek képződtek. Az így kezelt minták tripszinnel történő hasítását követően, tömegspektroszkópiás (MS) mérési eredményekből meghatározható, hogy mely aminosavak vannak egymással térközelségben a fehérjeláncban, a dimerben és a komplexben.

Antiangiogén tirozinkináz-inhibitorok hatásának vizsgálata egér colon tumor modelleken

Tisza Anna, BSc IV. évf.

Témavezető: **Török Szilvia** kutató biológus

Országos Korányi Tbc és Pulmonológiai Intézet

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Az antiangiogén daganatterápiák terén az elmúlt években elért jelentős haladás ellenére a legtöbb beteg teljes túlélésében beállt javulás elenyésző, és a gyakran megfigyelt elsődleges vagy másodlagos rezisztencia mechanizmusok folyamata nem egyértelmű. Ezért dolgozatomban két egér colon tumor modellen vizsgáltuk a különböző antiangiogén receptor tirozinkináz –inhibitorok (TKI) hatását. Az egyik tumor modellben (C-26) különböző csoportokat generáltunk, és kezeltük az egereket egy-egy TKI-val (motesanib, pazopanib, sorafenib, sunitinib, vatalanib), majd MALDI tömegspektrométerrel detektáltuk a gyógyszereket. Azt tapasztaltuk, hogy bár minden TKI sikeresen felszívódott, egyedül a sunitinib volt szignifikáns hatással a tumorméretre, és különböző vaszkuláris paraméterekre (érdenzítés, VEGFR2- és dezmin expresszió, hipoxiás területek aránya). Ezzel összhangban, a tumorokban a sunitinib volt legnagyobb koncentrációban megtalálható, míg egyes gyógyszerek egyáltalán nem voltak detektálhatóak (sorafenib, vatalanib). Ezzel szemben a másik tumor modellben (C-38) vatalanibbal kezeltük az egereket. Azt láttuk, hogy bár a kontroll csoporthoz képest szignifikáns tumorméret-csökkenést tapasztaltunk, és a gyógyszer detektálható volt a tumorokban, viszont a C-26 esetén vizsgált vaszkuláris paraméterekben nem mutatkozott változás. Tehát kísérletünkben kimutattuk, hogy az egyes antiangiogén TKI-k hatása tumormodell-függő és hogy a MALDI tömegspektrometria alkalmas ezen gyógyszer-csoport hatásának vizsgálatára. Emellett megfigyeltünk mind primer (C-26 vatalanibbal vagy sorafenibbal kezelve), mind szekunder (C-38 vatalanibbal kezelve) rezisztencia mechanizmusokat is.

Rejtett hibák és bizonytalanságok feltárása az eleveniszapos foszfor eltávolítási hatékonyság meghatározásában

Hári Máté Ferenc, BSc IV. évf.

Nagy Eszter, BSc IV. évf.

Témavezető: **Bakos Vince** egyetemi tanársegéd

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A kutatás célja annak feltárása, hogy melyek a leggyakoribb nehézségek az eleveniszapos foszfor eltávolítási hatékonyság meghatározásában és hogyan kerülhető el a hatékonyság téves felmérése, valamint annak következményeként a technológia esetleges „félre-optimalizálása”.

A kutatás nagyüzemi eleveniszapos rendszer vizsgálatán keresztül mutatja be, hogy a reprezentatív mintavétel és tárolás kulcsfontosságú, mivel az eleveniszapot tartalmazó mintában a mikroorganizmusok már rövid idő alatt is jelentős mennyiségű foszfort nyomhatnak vissza a vízfázisba. Igazoltuk, hogy a tisztított szennyvíz foszfortartalma nem ad elég információt a biológiai folyamat hatékonyságára, ahhoz szennyezőanyag koncentráció profilmérésekre van szükség. Profilmérések alátámasztották, hogy a – sok esetben túlzott mértékű – vegyszeradagolás mérés technikailag elfedheti, technológiailag pedig elnyomhatja a PAO-aktivitást. A túlzott vegyszermennyiség „látens” jelenlétének káros hatásait laboratóriumi kísérleteink is alátámasztották. Laboratóriumi szakaszos kísérletekkel kimutattuk, hogy a vegyszer bekeverésének döntő hatása van a foszfor kicsapás hatékonyságára. Igazoltuk, hogy a reaktor felszínén át beoldódó oxigén gátolja a PAO-k működését, a felvett szerves anyagra vonatkoztatott foszfor visszanyomási hatékonyság jelentősen nagyobbak adódott fedett reaktorok alkalmazása mellett. A reaktor lefedéssel „megtakarítható” befolyó jól biodegradálható KOI 60-70 mg/l körülnek mutatkozott.

A komplex vizsgálatokból nyert eredmények olyan irányadó vizsgálati módszertani és technológiai javaslatoknak tekinthetők, amelyek hatékony és költségkímélő üzemeltetést tesznek lehetővé.

Olvadék szálfűvés gyógyszer technológiai alkalmazása

Farkas Balázs, BSc IV. évf.

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Balogh Attila** doktorjelölt

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az utóbbi időben felfedezett hatóanyagok jelentős részének gyenge vízoldhatósága miatt a gyógyszerkészítményekkel nem érhető el a kívánt terápiás hatás és megfelelő biohasznosíthatóság a szervezetben, ami azonban új formuláció bevezetésével megoldható. Sikeresen alkalmazzák a szilárd diszperziókat, melyek szilárd, legtöbbször polimer hordozós, hatóanyag-tartalmú rendszerek. A változatos szilárd diszperziós előállítási módszerek közül ígéretes lehetőség az elektrosztatikus szálképző technológiák alkalmazása, mely során egy polimer oldatból vagy olvadékból nagyfeszültségű elektromos térerősség hatására nagy fajlagos felületű szálak szövődnek, a módszer amorfizáló hatásának köszönhetően javíthatóak a hatóanyagok kioldódási jellemzői. Az olvadék szálfűvés során az alapanyag olvadékát nagysebességű gázáramba táplálják, melynek húzóereje hozza létre a szálakat. Az eljárás oldószermentes és jelentősen nagyobb termelékenységet lehet elérni vele, mint az elektrosztatikus szálképző módszerekkel, azonban gyógyszer technológiai alkalmazására eddig nem volt példa.

Ezek alapján a kutatómunkám célja gyorsított hatóanyag-leadású szilárd diszperziók előállítása volt olvadék szálfűvéssel és az ezzel az új módszerrel készült szálak összehasonlítása az elektrosztatikus szálképző technológiákkal és az extrúzióval készült termékekkel. Modell hatóanyagként a carvedilolt, a vékonybél semlegeshez közeli kémhatású közegében különösen gyengén oldódó gyenge bázist alkalmaztam.

A kristályossági fok vizsgálatok kimutatták, hogy valamennyi mintában amorf állapotú volt a hatóanyag, míg a HPLC tisztaságvizsgálatok alapján a minták szennyezettsége is elfogadhatónak bizonyult. Valamennyi formuláció gyorsított kioldódást mutatott semleges közegben a nagy fajlagos felületnek és a hatóanyag amorf formájának köszönhetően, az olvadék alapú szálképző módszerek figyelemre méltóan teljesítettek. Az eredmények alapján az olvadék szálfűvés eredményesen alkalmazható gyorsított hatóanyag-leadású készítmények előállítására.

Desztillációs technológiák vizsgálata szénhidrogén elegy példáján

Tarjáni Ariella Janka, BSc IV. évf.

Témavezető: **Farkasné Szőke-Kis Anita** PhD hallgató

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A desztilláció művelete fontos szerepet tölt be a vegyipar szeparációs eljárásai között, hiszen folyadékelegyek elválasztására ez a leggyakrabban alkalmazott módszer. A többkomponensű elegyek elválasztására több kiforrott technológia is létezik, amelyek ma is folyamatos fejlesztés alatt állnak. A fejlesztések célja korunk általános elvárásainak megfelelően az energiahatékonyság és a költségcsökkentés.

A dolgozatom témája három különböző desztillációs eljárás összehasonlító elemzése egy négykomponensű szénhidrogén elegy elválasztásának példáján. Vizsgáltam az adott elegy elválasztásához szükséges összes hagyományos kolonna-kapcsolást, illetve két alternatív konstrukciót. Az alternatívák közül az egyik egy termikusan csatolt konstrukció, a másik pedig egy osztott falú kolonna. A számítások elvégzéséhez a Chemstations CHEMCAD szoftverét használtam. A munkám során elkészítettem az öt hagyományos kapcsolás, és a két alternatív konstrukció rigorózus modelljét, ezek méretezését és költségbecslését. A vizsgált folyamatstruktúrák összes költsége, és energiahatékonysága alapján kiválasztottam az adott szénhidrogén elegy elválasztására leginkább alkalmas eljárást.

Önszerveződő nanohordozós organokatalizátorok újfajta előállítására és alkalmazására aszimmetrikus reakciókban

Baranyi Bernadett, MSc II. évf.

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulensek: **Sóti Péter Lajos** doktorjelölt

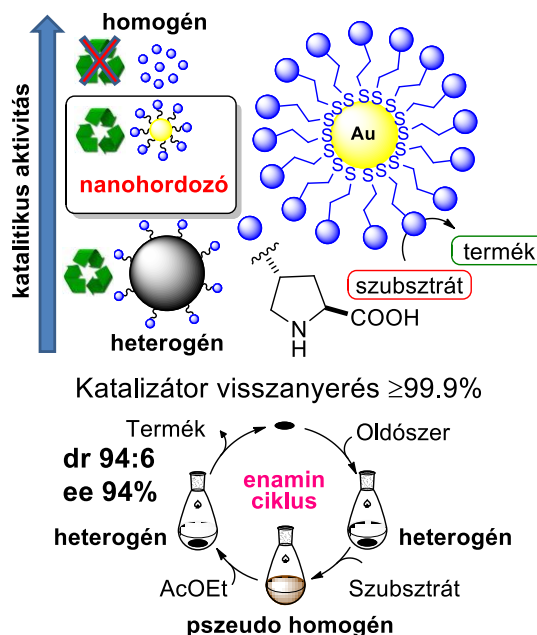
LAVET Gyógyszergyártó Kft.,

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Nobuyuki Mase egyetemi tanár

Shizuoka Egyetem, Alkalmazott Kémia és Biomérnöki Tanszék (Japán)

Az organokatalizátorok az aszimmetrikus szerves kémiai szintézisekben széleskörűen alkalmazott kismolekulás vegyületek, amelyek környezetbarát reakciókörülményt tesznek lehetővé. Egyik fő csoportjukat alkotja a prolin és származékai, amelyek alkalmazása során gyakran magas katalizátor/szubsztrát arány (akár 30-40 mol%) szükséges, így a széleskörű elterjedés és ipari felhasználás megteremtése érdekében biztosítani kell visszaforgatásukat és újrahasznosításukat. Ez - a legegyszerűbb módon- a katalizátorok szilárd hordozón való rögzítésével érhető el, ebben az esetben viszont a reakcióelegy heterogénné válik, csökkentve a katalizátor aktivitását és szelektivitását (1. ábra)¹. Munkám során az eddig publikált eljárásokhoz képest jóval hatékonyabb, egyszerűbb és kevesebb reakciólépést igénylő eljárást dolgoztam ki nanorészecske hordozós prolin alapú organokatalizátorok szintézisére. Elsőként valósítottam meg „onepot” redukcióval történő előállítást, melynek eredményeként 3 nm-es, szférikus, katalizátor tartalmú részecskéket kaptam. Az immobilizált aminosav-származékokat aszimmetrikus reakciókban alkalmaztam és kiváló termeléssel (99%), magas diasztereo- és enantioszelektivitással (dr 94:6, ee 94%) jutottam az aldol termékekhez (1. ábra). A rögzített organokatalizátor többszöri visszaforgatása és újrafelhasználása változatlan konverziót, termelést, diasztereo- és enantioszelektivitást eredményezett, továbbá a nanohordozónak köszönhetően sikerült ötvözni a homogén és heterogén átalakítások előnyeit. Így megállapítható, hogy sikerült egy olyan szintézisutat kidolgozni, amely robusztus katalizátort eredményez és könnyen általánosítható, akár más típusú nanorészecske felületén immobilizált katalizátor előállítására is alkalmas.



1. ábra Nanohordozós organokatalizátor és visszanyerése

¹ Lee, J.-W., Mayer-Gall, T., Opwis, K., Song, C.E., Gutmann, J.S., List, B., *Science* **2013**, 341, 1225–1229.

Gyógyszermolekula-ciklodextrin komplexek vizsgálata automatizált analitikai módszerek segítségével

Dargó Gergő, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Balogh György Tibor** osztályvezető, címzetes egyetemi docens
Richter Gedeon Nyrt. Szintézistámogató Laboratórium
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A szervezetbe kerülő, a gasztrointesztinális rendszeren áthaladó gyógyszerek esetében a biohasznosulást nagymértékben befolyásolja a vegyületek felszívódása, ami fizikai-kémiai értelemben elsősorban ezek oldhatóságától, és permeabilitásuktól függ. Ennek megfelelően a rossz oldhatóságú és/vagy gyenge penetrációs képességű vegyületek körében rendre alacsony biohasznosulású vegyületekkel találkozhatunk, így a hatóanyag formulálásakor a biohasznosulás és így ezen fizikai-kémiai sajátságok javítására van szükség. Az ily módon fejlesztett, az alpmolekulánál fokozottabb biohasznosulást mutató készítményből kisebb dózis bevétele is elegendő, ami szervezetünket is kevésbé terheli.

Ciklodextrinek, mint formulációs segédanyagok alkalmazásával a vegyületek oldhatósága, illetve permeabilitása is növelhető. A jó víz oldhatóságú ciklodextrinek komplexképzés során segítik a gyógyszermolekulák oldatban tartását a gasztrointesztinális rendszer vizes közegében, elősegítik azok átjutását a biológiai membránokon keresztül. Figyelembe kell vennünk azonban, hogy az egyes molekulák nem mindegyik ciklodextrin származékkal képesek komplexképzésre, illetve a komplexképzésre képes ciklodextrinek is eltérő erősségű, sztöchiometriai viszonyú zárvány-komplexeket fognak létrehozni. Formuláció során pedig azt a ciklodextrint érdemes a vegyülethez választani, amellyel stabil komplex kialakítására képes.

Ezek alapján célul tűztük ki egy olyan automatizált módszer kialakítását a komplexképzés vizsgálatával, melynek segítségével a különböző gyógyszerjelölt vegyületek esetében ki lehet választani azt a ciklodextrin származékot, amellyel a legstabilabb komplexet képezi. Az így választott ciklodextrinnel történő formuláció során kapott készítmény várhatóan kedvező biohasznosulású lesz. Munkánk során a komplexstabilitást vizsgáló módszerek közül a gyógyszervegyület, illetve a ciklodextrinnel képzett komplexének fizikai-kémiai sajátságainak megváltozásán alapuló módszereket használtuk.

Alkaloid koncentráció szabályozása macskakarom (*Uncaria Tomentosa* [Willd.] DC) kivonatokban hagyományos kevertetési extrakcióval

Dévényi Dániel, BSc IV. évf.

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

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Konzulens: **Calvo García Alba** PhD hallgató

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A macskakarom (*Uncaria Tomentosa* [Willd.] DC) egy Amazonas erdei kúszónövény, tradicionálisan indián gyógynövény. Világszerte ajánlják ízületi bántalmak csökkentésére és általános immunerősítőként, daganat- és vírusellenes hatását is feltételezik. A növény gyógyhatását a kérgében található pentaciklusos alkaloidok, triterpének, flavonoidok és tanninok adják. A gyógynövény- és kivonatainak alkalmazását a világ számos országában széleskörűen engedélyezik (pl.: USA, Ausztria), míg más országokban, köztük hazánkban is, a magas alkaloidtartalma miatt korlátozzák. A kutatómunka célja az alkaloidtartalom szabályozása a kivonatokban hagyományos extrakciós eljárással, amely egy további termékfejlesztés és alkaloidtartalomra való standardizálás alapja lehet.

A munkám során örölt macskakarom kéregből víz, abszolút etanol, 50:50 víz – etanol, illetve előbbi oldószer különböző citromsav tartalmú oldataival három lépéses hagyományos kevertetési extrakcióval kivonatokot készítettem, amely során az extraháló oldószer összetétele, a hőmérséklet, extrakciós idő és a lépésszám hatását vizsgáltam a kivonat alkaloid-koncentrációjára és a citromsavtartalommal korrigált termelésre.

Az extrakció hőmérsékletének vizsgálatai során a 70 °C bizonyult a legmegfelelőbbnek, mivel ezen a hőfokon volt a legnagyobb az alkaloid-koncentráció és a korrigált hozam. Az extrakciós idő 0,5 – 2 óra tartományban már nem befolyásolja az extrakciós hatékonyságot, valamint a három lépés elengedő. Az etanol és a citromsav együttes hatásának vizsgálatát egy 3^2 kísérlettervvel végeztem. Megállapítottam, hogy citromsav oldat felhasználásával jól ismételve 5 – 37,3 mg alkaloid/ g extrakt tartományban szabályozható a kivonatok alkaloid koncentrációja. Maximális alkaloid-koncentráció a kivonatban citromsavmentes abszolút etanol alkalmazásával érhető el. A korrigált termelés optimuma 50:50 víz – etanol oldószer esetén 1 – 1,2 tömegszázalék citromsav tartalom. A kivonatok tannin mennyiség és szabadgyök-fogó képesség vizsgálata során, arra a következtetésre jutottam, hogy a macskakarom kivonatok antioxidáns hatásáért feltehetőleg a tanninok a felelősek. Az 50:50 víz – etanol oldószerrel kapott kivonat tannin tartalma igen magas, $25,08 \pm 1,14$ % és gyökfogó hatása is kiváló.

A vizsgálataim során kapott eredmények lehetőséget biztosíthatnak egy alkaloidra standardizált termékfejlesztésre viszonylag olcsó és könnyen megvalósítható üzemi technikával.

Hordozós ródiumpatalizátorok mérgeződésének és visszaforgathatóságának vizsgálata pirrolok hidrogénezésében

Le Ba Thong, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Hegedűs László** tudományos főmunkatárs
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A heterogén katalitikus hidrogénezés az egyik leggyakrabban alkalmazott ipari redukciós eljárás, aminek fontos szerepe van például a gyógyszer-, a petrokkémiai, valamint a mezőgazdasági és a növényvédőszer-iparban. A hidrogénezési reakciók általában szelektívek és viszonylag könnyen megvalósíthatóak, a katalizátort újra felhasználják. Az alkalmazható heterogén hidrogénező katalizátorok a hordozós nemesfém-, a vázkatalizátorok és a kormok. Jellegzetes képviselők a palládium, platina, ródiump vagy a ruténium nagy fajlagos felületű hordozóra (pl. aktív szén, Al_2O_3 , SiO_2) felvitt formája, valamint a Raney-típusú (pl. Ni, Cu, Co) katalizátorok.

Régóta ismert, hogy sok vegyület már kis mennyiségben is csökkenti, sőt teljesen meg is szünteti a katalizátorok aktivitását. Ezeket az anyagokat *katalizátormérgeknek* nevezzük, amelyek jellemzően nitrogén-, foszfor-, arzén-, illetve kéntartalmú molekulák, fémek (pl. Pb), fémionok (pl. Fe^{2+}), valamint halogenid ionok (pl. Cl^-) lehetnek. A gyógyszeriparban használt és előállított, biológiailag aktív vegyületek gyakran tartalmazznak 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 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 folyó kutatómunkába – azt vizsgáltam, hogy a használt hordozós ródiumpatalizátorokat (Rh/C , $\text{Rh}/\text{Al}_2\text{O}_3$) regenerálás nélkül visszaforgatva, az eredeti reakcióhoz képest milyen változásokat tapasztalunk az aktivitásokban, valamint a konverziókban. Modellreakciónak az *N*-metilpirrol savmentes közegű hidrogénezését választottuk.

Etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxid rezolválása TADDOL- és borkősav-származékokkal

Varga Bence, BSc IV. évf.

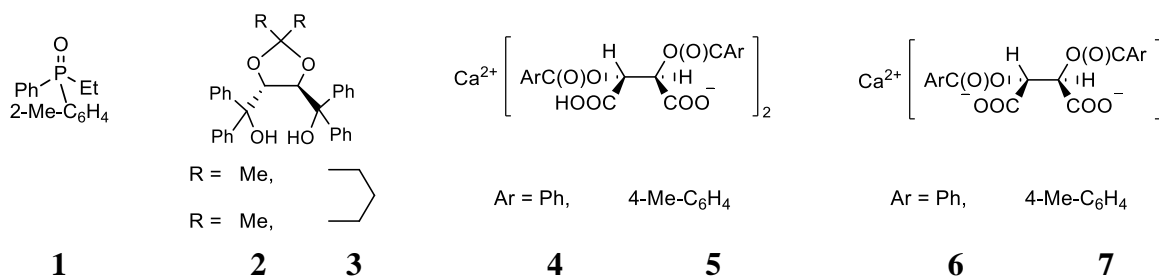
Témavezetők: Dr. Bagi Péter posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

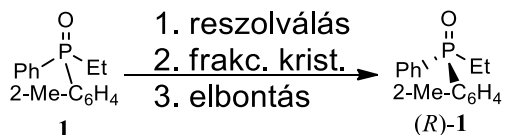
Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékén a foszforkémiával és rezolválással is foglalkozó kutatócsoport munkájába bekapcsolódva, TDK munkám során célul tűztük ki, hogy a kutatócsoportban korábban heterociklusos foszfin-oxidok enantiomerjeinek elválasztására kidolgozott rezolválási módszereket kiterjesszük aciklusos foszfin-oxidokra, modellvegyületként az etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxidot (**1**) alkalmazva.



A racém etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxid (**1**) szintézisének kidolgozása után, annak rezolválását vizsgáltuk TADDOL-származékokkal (**2** és **3**), illetve (-)-*O,O'*-dibenzoil- és (-)-*O,O'*-di-*p*-tolouil-borkősav savanyú és semleges (**4-7**) Ca^{2+} -sóival. Optimalizáltuk a rezolválás során alkalmazott körülményeket. Emellett egy rezolválási technológiához elengedhetetlen lépésként, az etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxid (**1**) enantiomerkeverékek tisztítási és racemizációs lehetőségeit is vizsgáltuk. Az elvégzett rezolválási és enantiomerkeverék-tisztítási kísérletsorozat végén 99% enantiomertisztaságú (*R*)-etil-fenil-(2-metilfenil)foszfin-oxidot [(*R*)-**2**] tudtunk előállítani. Egy esetben a keletkezett diaszteromer asszociátumot egykristály röntgendiffrakciós méréssel is tanulmányoztuk.



Optikailag aktív gamma-valerolakton stabilitás vizsgálata és alkalmazása

Fridrich Bálint, MSc I. évf.

Témavezető: **Dr. Mika László Tamás** egyetemi docens
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Tukacs József Márk** egyetemi tanársegéd
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Kutatómunkám során megvizsgáltam a biomassza eredetű hulladékok optikailag aktív gamma-valerolaktonná, mint javasolt királis platform molekulává történő átalakításának lehetőségét és az előállított termék kiralitáscentrumának stabilitását. Kísérleteim igazolták, hogy a korábban kidolgozott eljárások alapján D-fruktózból savkatalizált dehidratációval előállított levulinsavból 100%-os konverzióval, kemoszelektivitással és 78%-os enantiomertöbbslettel (*ee*) sikerült (*S*)-gamma-valerolaktont (GVL) előállítani, azaz a levulinsavban található esetleges szennyezők nem befolyásolják az alkalmazott katalizátor aktivitását és szelektivitását. További kísérlettel igazoltam, hogy nem ehető mezőgazdasági hulladékból (búzaszalma, napraforgóhéj stb. keveréke), azonos technológiával előállított majd vákuumdesztillációval tisztított levulinsavat szintén 100%-os kemoszelektivitással és 80%-os enantiomertöbbslettel (*ee*) lehetett (*S*)-gamma-valerolaktonná redukálni. Az optikailag aktív GVL további felhasználása (gyűrűnyitás/zárás) szempontjából kulcskérdés a molekula kiralitáscentrumának stabilitása. Az előbbiként előállított (*S*)-GVL sztereo centrumának stabilitását 1-13-mas pH- és 25-100 °C hőmérséklet tartományban vizsgáltam. A GVL gyűrű felnyílását majd visszazáródását ¹⁸O izotópjelzéses technika segítségével igazoltam. Eredményeim szerint a vizsgált tartományban a GVL királis szénatomjának abszolút konfigurációja nem változott meg. A stabilitásvizsgálat után az optikailag aktív GVL felhasználásával előállítottam további két optikailag aktív vegyületet, amelyeknek szerkezetét NMR-el és/vagy királis állófázisú gázkromatográf segítségével igazoltam. A preparált ionos folyadék (tetrabutylammonium-(*S*)-4-hidroxivalerát [TBA](*S*)-[4HV]) királis reakció-közegként használható, míg a GVL további redukációjával nyert optikailag aktív 1,4-pentándiol (1,4-PDO) építőköként kerülhet felhasználásra további szerves kémiai szintézis sémákban. Továbbá bemutatom az optikailag aktív 1,4-PDO általunk alkalmazott szintézisének zöldkémiai szempontok alapján elvégzett elemzését.

4-Klórmandulasav resolválása gáz antiszolvens kristályosítási technika alkalmazásával

Kőrösi Márton, MSc II. évf.

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

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Konzulens: **Zodge Amit** PhD hallgató

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Enantiomertiszta vegyületek előállítását a vegyipar számos ágazata igényli, mivel az egyes enantiomerek élettani hatása erősen eltérő lehet. Gyakran kedvezőbb a sztereoszelektív szintézis helyett az optikailag aktív vegyületet resolválással előállítani. Erre kínálnak lehetőséget a diasztereomer sóképzésen alapuló elválasztások, ezen belül is innovatív lehetőségként a szuperkritikus közegben végzett kristályosítás. A szén-dioxid oldószerként, vagy kicsapószerként történő alkalmazása a szerves oldószerek használatát csökkenti, illetve új módszerek kidolgozására ad lehetőséget.

TDK munkám során a számos szerves kémiai szintézis intermediereként, valamint resolválószerként is használt 4-klórmandulasav az irodalomban eddig nem ismert antiszolvens diasztereomer sóképzésen alapuló resolválását dolgoztam ki az előkísérletektől a továbbtisztíthatóság vizsgálatáig. A resolváló ágensként használt (*R*)-1-feniletánamint félekvivalens mennyiségben adagoltam. A diasztereomer sókat a reakciókomponensek metanolos oldatából, szén-dioxid hozzáadásával, gáz antiszolvens technikával kristályosítottam, majd az elreagálatlan, oldatban maradó sav-enantiomert és a szerves oldószert szén-dioxid átáramoltatásával távolítottam el az autoklávból.

Fázisegyensúlyi méréseket végeztem a resolválási kísérletek során alkalmazható bemérési koncentrációk feltérképezésére, ezután látóüveges autoklávban figyeltem meg a kristályképződést. A szén-dioxid hozzáadása után a kristálykiválás azonnal megkezdődik, és a kristálynövekedéssel együtt folytatódik az egy órás keverési idő alatt.

Részletesen tanulmányoztam a nyomás, a hőmérséklet és az oldószerek (a szén-dioxid és a metanol) tömegarányának hatását a resolválásra. 160 bar nyomáson, 40 °C hőmérsékleten, 7,5-es oldószerarány mellett a raffinátumként nyert (*R*)-(*R*) só enantiomertisztasága (*ee*) egy lépésben meghaladta a 70%-ot, 70%-os termelés mellett. A resolválási rendszer nyomása (120-200 bar tartományban) és hőmérséklete (35–55°C tartományban) csak kismértékben befolyásolja a resolválás hatékonyságát, legnagyobb szerepe az oldószeraránynak van. Az enantiomerkeverék átkristályosítással továbbtisztítható, egy második resolválási lépésben 90% enantiomertisztaságot értem el.

A kristályos diasztereomer só képződését a raffinátumokban röntgen-pordiffrakciós elemzéssel igazoltam. A raffinátumok kristályszerkezete az enantiomertisztaságtól függetlenül megegyezett. Ennek ellenére a pásztázó elektronmikroszkópiával megvizsgált mintákban a kristályok formája és mérete egymástól jelentősen eltért a kristályosításhoz alkalmazott paraméterek hatására.

>P(O)H reagensek addíciója iminekre mikrohullámú körülmények között

Ádám Anna, BSc. IV. évf.

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

MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport

Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

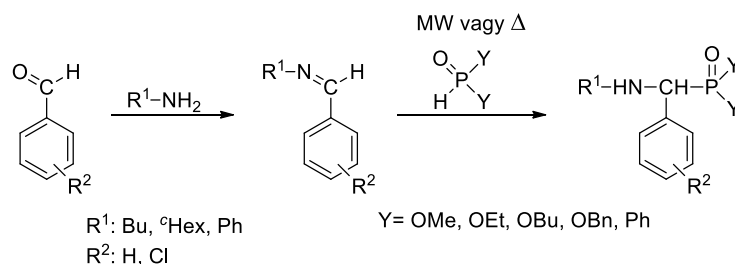
BME Szerves Kémia és Technológia tanszék

Konzulens: **Tajti Ádám** PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia tanszék

Az α -aminofoszfónátok, mint az α -aminosavak analogonjai, sokoldalú felhasználhatóságuk és bioaktivitásuknak köszönhetően széleskörű tudományos érdeklődésre tartanak számot. Kutatócsoportunkban eddig Kabachnik-Fields-reakcióval vagy α -hidroxifoszfónátokból szubsztitúciós reakcióval szintetizáltak α -aminofoszfónátokat [1]. Kutatómunkám során egy harmadik lehetőséget, az iminekre $>P(O)H$ reagensek addíciójával történő előállításokat tanulmányoztuk.

Munkám első részében különféle primer aminok és aldehidek reakciójában imineket (Schiff-bázisokat) szintetizáltunk. Az így előállított iminekre különböző $>P(O)H$ -funkciót tartalmazó vegyületek (dialkil-foszfitek, vagy difenilfoszfin-oxid) addícióját tanulmányoztuk. A környezetbarát megvalósítást szem előtt tartva, oldószer és katalizátor nélkül, mikrohullámú körülmények között végeztük el az addíciókat. A reakció körülményeinek (hőmérséklet, idő, molarányok) változtatásával kerestük az optimális paramétereket. A mikrohullámú és a hagyományos fűtés közötti különbségek demonstrálására termikus összehasonlító kísérleteket is végeztünk. A reakciók lejátszódását *in situ* FT-IR spektroszkópiás módszerrel monitoráltuk.



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

Fixfilmes szennyvíztechnológia üvegházhatású gázkibocsátásának becslése

Bencsik Dániel, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Csikor Zsolt** egyetemi docens

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Fixágyas biofilm hordozóval ellátott, félüzemi léptékű szennyvízkezelési technológia üvegházhatású gázkibocsátását vizsgáltam különböző üzemeltetési paraméterek mellett. Az egyes változatok kibocsátását széndioxid egyenértékben fejeztem ki. A számításokhoz biokinetikai modellre épülő, GHG-kibocsátást számszerűsítő felületet alkalmaztam, melyhez a GPS-X 6.3 szoftvert használtam. A kinetikai paramétereket úgy állítottam be, hogy a modell megfelelően közelítse a reaktorkaszkádról elfolyó szennyvízminőségi paramétereket. A kalibrációhoz, azaz a tapasztalt és a modellezett értékek egymáshoz illesztésére olyan tizenkét napos mérésorozatot használtam alapul, ahol a rendszer működése közelítőleg állandósult állapotban volt. A szimulációs eredmények minden esetben azt mutatják, hogy a közvetlen, biológiai eredetű gázkibocsátások számottevőbbek, mint a közvetett, energiafelhasználásból eredőek. A különböző változatokban vizsgáltam a reaktortérfogat, levegőztetés, hőmérséklet és nitrárecirkuláció hatását a kibocsátásokra nézve: a vizsgált paraméterek közül a reaktortérfogat növelése magasabb hidraulikai tartózkodási idővel jár; így, az alacsonyabb elfolyó koncentrációk mellett, jóval kevesebb dinitrogén-oxid gáz felszabadulását is eredményezi, a hatékonyabb nitrifikációnak és denitrifikációnak köszönhetően; és csupán kismértékben növeli a közvetett kibocsátásokat, a magasabb levegőztetési igény miatt. A hőmérséklet emelkedése a biológiai reakciók sebességét növeli; így a vizsgált elfolyó paraméterek szempontjából ugyan kedvező; ám az üvegházgáz fejlődést – különösen a dinitrogén-oxid-, és metánképződést – megnöveli. Ezen túlmenően az oxigén rosszabb oldhatósága miatt a közvetett üvegházhatású gázkibocsátást is megemeli. A belső recirkuláció térfogatáramának növelésével hatékonyabb a denitrifikációs folyamat, de a reaktorba érkező szén/nitrogén arány csökkenése több dinitrogén-oxid gáz felszabadulását idézi elő, megnövelve az összkibocsátást; melyhez képest a szivattyúzás energiaigénye miatt a közvetett kibocsátás csak elhanyagolható mértékben növekszik. Az aerob reaktorokban jellemző oldott oxigénszint növelése kedvez a szervesanyag-eltávolításnak és a nitrifikációnak, mely kismértékben növeli a széndioxid-kibocsátást; viszont ez által egyre inkább aerob körülmények állnak fenn, és egyre kisebb mértékben szabadul fel metán, illetve dinitrogén-oxid, csökkentve az eredő kibocsátást.

Karbamidzármasok újszerű szintézise áramlásos reaktorban

Lakó Ágnes, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Greiner István** kutatási igazgató

Richter Gedeon Nyrt.

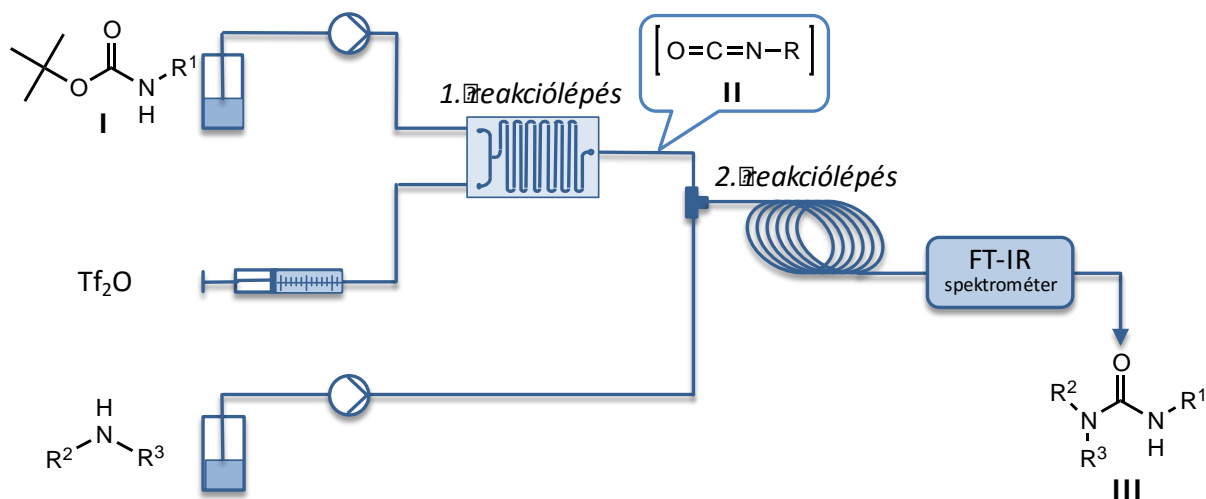
Konzulensek: **Bana Péter** PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Kiss Nóra Zsuzsa egyetemi tanársegéd

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A korszerű, laboratóriumi méretben alkalmazható áramlásos kémiai módszerek lehetővé teszik sorba kötött folytonos mikroreaktorok üzemeltetését. Az így kialakított rendszerekben szerves vegyületek többlépéses szintézise valósítható meg.



1. ábra

Szubsztituált karbamidzármasok újszerű szintézisére nyílik lehetőség közvetlenül a *tert*-butoxikarbonil védőcsoporttal ellátott aminokból kiindulva. Ezen két lépéses reakció megvalósítására olyan folytonos üzemű rendszert (1. ábra) terveztünk és állítottunk össze, melyben a védett aminból (I) az első reaktorban izocianát köztitermék (II) képződik, melyet izolálással nélkül egy újabb reaktorban szekunder aminnal reagáltatva a megfelelő karbamidzármas (III) keletkezik.

Az áramlásos rendszerben a szóban forgó átalakítás körülményeit in-line analitikai módszer (FT-IR spektroszkópia) alkalmazásával finomhangoltuk, csökkentettük a nemkívánatos reagensfeleslegeket és javítottuk a termelékenységet a szakaszos eljáráshoz képest. A kifejlesztett módszerrel több gyógyszerkémiaileg releváns karbamidzármas szintézisét végeztük el, jó termelésekkel.

Poli(etilén-tereftalát) hulladék kémiai újrahasznosítása és az új, értéknövelt termékek jellemzése

Bugyi Orsolya, MSc II. évf.

Témavezető: **Dr. Vargha Viktória** ny. tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Dolgozatom témája poli(etilén-tereftalát) (PET) hulladék glikolízise és a keletkező poliészter-poliol termékek jellemzése. A glikolízishez kétféle reagenst, 200 g/mól átlagos móltömegű polietilén-glikolt(PEG200) és dietilén-glikolt(DEG) használtam. A reagenseket önmagukban, illetve vegyes lebontások esetén együttesen-különböző mól-arányokban alkalmaztam PET hulladék kémiai bontására. A reakciók során a komponensek arányát szisztematikusan változtattam, a termékek jellemzésekor kerestem az összefüggést a felhasznált reagensek, azok aránya és a termékek tulajdonságai között.

A Fourier Fourier-Transzformációs Infravörös Spektroszkópia eredményei azt mutatják, hogy az átészterezés végbement, a keletkezett termékekben hidroxil-csoportok és új észter-csoportok keletkeztek.

A gélpermeációs kromatográfias vizsgálatokból megállapítható, hogy az előállított poliészter-poliolok molekulatömeg-eloszlása hasonló, mind szám szerinti, mind tömeg szerinti molekulatömegük alacsony, és hogy az alkalmazott alkohol reagensek a glikolízis során elreagáltak.

A viszkozitás mérések eredményeiből a poliészter-poliolok newtoni folyadékként történő viselkedésére következtettem, mely alól csak egy, a PEG200 reagenssel készült termék a kivétel, amely pszeudoplasztikus. Ez a viselkedés azonban a reagens mólarányának növekedésével megszűnik. A viszkozitást befolyásolja az alkalmazott reagens minősége, a DEG reagens alkalmazása a viszkozitás növekedését okozza. Nehéz a komponens-arányok és a viszkozitás alakulása között összefüggést találni, az össz-reagens arány növelése a viszkozitás csökkenését okozza. Az anyagok anomáliás viselkedésének tisztázására további kutatások szükségesek.

α,β -Telítetlen észterek boránkatalizált hidroszililezése

Molnár Dániel, BSc IV. évf.

Témavezetők: **Fegyverneki Dániel** tudományos segédmunkatárs

MTA TTK Organokatalízis Kutatócsoport

Dr. Soós Tibor megbízott intézetigazgató, tudományos főmunkatárs

MTA TTK Szerves Kémiai Intézet

Konzulens: **Dr. Hornyánszky Gábor** egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A hidroszililezési reakciók mára egyre fontosabb szerepet töltenek be a szerves szintézisekben. Redukciós eljárások során a szilánok alkalmazásának egyik nagy előnye könnyű kezelhetőségük mellett, hogy a legtöbb esetben enyhe reakció körülmények elegendőek a sikeres reakciókhoz, azonban ehhez katalízis szükséges. Számos ilyen típusú redukciót írtak már le legtöbbször átmenetifém alapú katalizátorokkal. Azonban ezen katalizátorok növekvő költségei miatt organokatalizátorok alkalmazásait célozzák.

Az α,β -telítetlen oxovegyületek hidroszililezéses redukciója mind elméleti, mind gyakorlati szempontból is érdeklődésre tart számot, mivel a konjugált kettőskötés rendszer miatt több termék keletkezése is lehetséges. Kutatócsoportunkban vizsgálták α,β -telítetlen aldehidek és ketonok szelektív hidroszililezését, valamint észterek aldehiddé történő redukcióját hidroszililezési reakciókban. Célul tűztük ki az α,β -telítetlen észterek reaktivitásának vizsgálatát hasonló körülmények között, valamint szelektív 1,4-hidroszililezésükkel szilil ketén acetálon át történő redukciójukat. Munkám során, egy a kutatócsoportunkban kifejlesztett Lewis sav katalizátor, a bisz(pentafluorofenil)meztitilborán segítségével végeztem hidroszililezéses redukciókat α,β -telítetlen észtereken. A reakció során a legtöbb szubsztrát esetén azonban α -szililezett melléktermékek keletkezése is tapasztalható, melyek más úton történő előállításuk alig ismert. Céлом az volt, hogy felderítsem az α -szililezett melléktermékek keletkezésének feltételeit. Egyrészt reakciókövetéssel vizsgáltam a mellékreakció időfüggését, másrészt az aromás gyűrűn különböző helyzetben lévő elektronküldő, vagy elektronszívó csoportokkal szubsztituált cinnamátésztereket alkalmazva próbáltam adekvát kapcsolatot találni a szerkezet és a mellékreakció affinitása között.

Az így keletkezett α -szilil észtereknek felhasználhatók kiindulási anyagként többek között Hiyama keresztkapcsolási, vagy Peterson féle olefinképzési reakciókban, ezért megpróbáltam a továbbalakítást. Emellett néhány, erre a célra előállított szubsztrát esetén redukzív Ireland-Claisen átrendeződést hajtottam végre.

Várhatóan daganatellenes hatású dimer alkaloidok szintézise

Pápai Réka, MSc I. évf.

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

Konzulens: **Dr. Keglevich Péter** egyetemi tanársegéd
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Kutatócsoportunkban évek óta folyik a kutatás a daganatellenes hatású vinblasztin és vinkrisztin származékok előállítására és továbbalakítására. Ehhez a munkához csatlakozhattam én is dolgozatom megírása során.

Munkám kezdetén a feladatom annak a dimernek az előállítása és továbbalakítása volt, amely a vindolin Simmon-Smith-reakcióban történő ciklopropanálásakor keletkezett nem várt termékként. A dimerből savhidrazid-származékot állítottunk elő, ám a vegyületet többszöri próbálkozás ellenére is csak kis mennyiségben kaptuk meg, így egyelőre nem tudtuk elvégezni az utolsó lépést.

Munkám második részében vindolinból kiindulva egy hétlépéses szintézissort dolgoztunk ki az (L)-triptofán-metilészterrel kapcsolt vinblasztinszármazék előállítására. A termék igen bomlékony, ezért tisztítása, amely nehézségekbe ütközik, még folyamatban van.

Kutatómunkám harmadik részében a ciklopropano-vinblasztin szintézisének utolsó két lépését próbáltuk optimalizálni. A reakcióelegy térfogatának csökkentésével, illetve a feldolgozás változtatásával sikerült jobb termeléseket elérni.

Munkám negyedik részében pedig célunk a ciklopropano-anhidrovinblasztin és a ciklopropanovinblasztin 17-es helyzetében található acetoxicsoport hidrolízise volt.

P-Heterociklusos foszfin-boránok és optikailag aktív foszfin-oxidok előállítása foszfóniumsó intermediereken keresztül

Herbay Réka, MSc. II. évf.

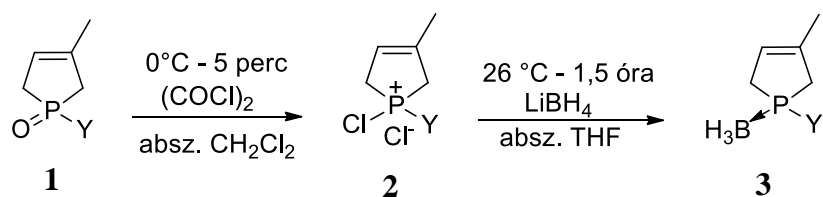
Témavezetők: **Dr. Bagi Péter** posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

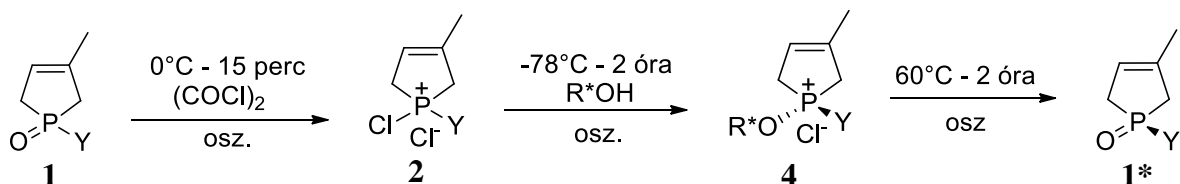
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

TDK munkám során irodalmi analógiák alapján megvalósítottuk foszfolén-boránok (**3**), illetve optikailag aktív foszfolén-oxidok (**1***) előállítását foszfóniumsó (**2**) intermediereken keresztül. A 3-foszfolén-oxidokat (**1**) oxalil-kloriddal reagáltattuk, és így a megfelelő klór-foszfóniumsókhoz (**2**) jutottunk, amelyeket ezután LiBH_4 -del reagáltatva a megfelelő foszfolén-boránokat (**3**) állítottuk elő 58-85%-os termeléssel. Ezzel az eljárással tehát a foszfolén-oxidok (**1**) deoxigénezésének és borán-komplex-képzésének praktikus „one-pot” eljárását dolgoztuk ki szilánok alkalmazása nélkül.



Y = Ph, Naft, 2-MeC₆H₄, 4-MeC₆H₄, Et, ⁿPr, ⁿBu, ⁱBu, ⁱPent

Az előállított gyűrűs klór-foszfóniumsók (**2**) értékes intermedierek, ugyanis azokat királis alkoholokkal reagáltatva egymással diasztereomer viszonyban álló alkoxi-foszfóniumsók (**4**) képződtek nem egyenlő arányban. Az alkoxi-foszfóniumsó (**4**) diasztereomerek keverékét melegítve *Arbuzov*-reakcióban a várt optikailag aktív foszfolén-oxidot (**1***) kaptuk 52-85%-os termeléssel, legfeljebb 21%-os enantiomertisztasággal.



Y = Ph, Naft, 2-MeC₆H₄, 4-MeC₆H₄, Et, ⁿPr, ⁿBu, ⁱBu, ⁱPent

R*OH = mentol, fenil-etanol, benzil-mandelát, 2-metil-butanol,

TADDOL, spiro-TADDOL, BINOL

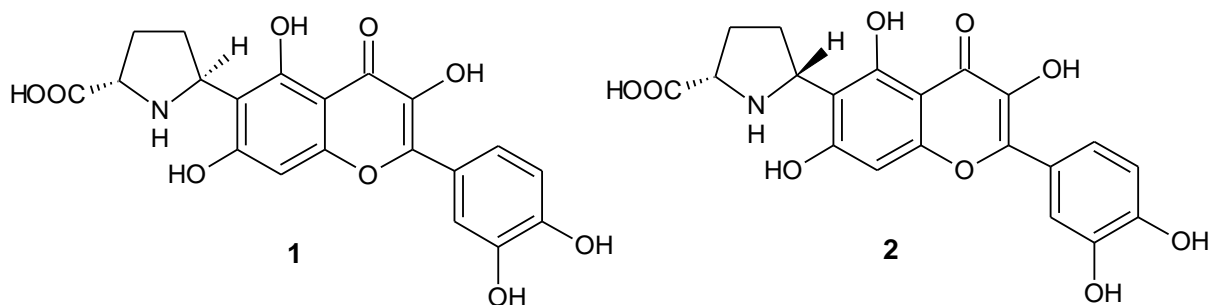
Kísérletek a prolinalin A és B szintézisére

Vámosi Péter, BSc IV. évf.

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

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

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő alkaloidkémiai kutatócsoportban a legújabb kutatások során olyan *N*-aciliminiumionokon keresztül megvalósítható reakciókkal foglalkoznak, melyek célja a természetben is megtalálható *N*-heterociklusos egységet tartalmazó alkaloidok előállítása. Ilyen típusú vegyületeket ölel fel a flavonoid alkaloidok családja, melyek közül számos képviselő szintézise még nem megoldott. Céлом a prolinalin A (1) és B (2) flavonoid alkaloidok előállítása a kutatócsoportban korábban kidolgozott eljárással, melynek során a megfelelő védőcsoportokkal ellátott gyűrűs amid redukciójával nyerhető aminokarbinol-típusú reagenst reagáltatom a flavonolvázis kvercetinnel.



A foszforosav szerepe dronátok szintézisében

Németh Orsolya, MSc II. évf.

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Grün Alajos egyetemi docens

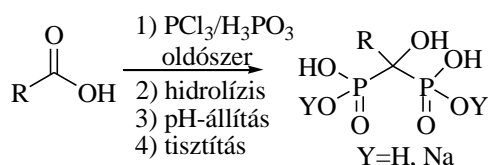
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Nagy Dávid Illés** PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszéken már évek óta foglalkoznak a biszfoszfonátok szintézisének környezetbarátabbá tételével. A kutatás során jó néhány, különféle oldalláncot tartalmazó dronsav/dronát szintézisét vizsgálták, azonban az irodalomban elterjedten alkalmazott foszforosavnak a reakciókra gyakorolt pozitív hatását eddig csak a benzidronát előállítása során figyelték meg metánszulfonsavat alkalmazva oldószernek, valamint a pamidronsav szulfolánban történő szintézisére is jó hatással volt a foszforosav hozzáadása.

Munkám során a foszforosav alkalmazásának hatását két másik dronát, a 3-fenilpropidronát és az alendronát előállítása során tanulmányoztam. A reakciókat a megfelelő karbonsavból kiindulva a P-reagensek (foszfor-triklorid és foszforosav) különböző molarányú alkalmazásával viteleztem ki.



R	Biszfoszfonát	Oldószer	Termelés (%)	Tisztaság (%)	Termék
Ph(CH ₂) ₂	3-fenilpropidronát	metánszulfonsav	53	>99	diNa*2H ₂ O
NH ₂ (CH ₂) ₃	alendronát	szulfolán	52	99	monoNa*3H ₂ O

A dronsavképződés mechanizmusának vizsgálata céljából a 3-fenilpropidronát esetén 3-fenilpropionsav-kloridból kiindulva is megvalósítottuk a szintézist.

Eredményeink mindkét esetben a foszforosav termelésre gyakorolt pozitív hatását támasztották alá, melynek feltehetően a foszfor-trikloridból és foszforosavból létrejövő reaktívabb (HO)₂P-O-PCl₂ addukt keletkezése az oka.

Királis koronaéterek szintézise és alkalmazása enantioszelektív katalizátorként

Nemcsok Tamás, MSc II. évf.

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Rapi Zsolt tudományos munkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Napjaink egyik legjelentősebb kihívása az enantiomertiszta vegyületek előállítása. Kutatómunkám során természetes alapanyagokból kiindulva olyan királis koronaétereket állítottam elő, melyek egyes fázistranszfer reakciókban katalizátorként alkalmazva aszimmetrikus indukciót válthatnak ki. A szintetizált koronavegyületeket enantioszelektív katalizátorként alkalmaztam különböző fázistranszfer reakciókban. A fő cél az volt, hogy új és/vagy minél nagyobb enantiomerfelesleggel rendelkező vegyületek képződjenek, amelyek potenciálisan királis intermediereként alkalmazhatók.

Dietil-L-tartarátból kiindulva sikeresen állítottam elő három L-treitol alapú lariat étert, többlépéses szintézisekkel. A védőcsoport, illetve az oldalkar minőségét változtatva kísérletet tettem a csoportunkban korábban előállított L-treitol alapú koronaéterek szerkezetének optimalizálására. L-Borkősavból kiindulva sikeresen szintetizáltam egy további, az L-treitol egységből felépített makrociklushoz igen hasonló, királis pirrolidin gyűrűt tartalmazó koronaétert is. Előállítottam továbbá két, (öttagú gyűrűs) glükofuranozid egységet tartalmazó koronavegyületet.

Az általam előállított koronaéterek hatását különböző reakcióban vizsgáltam. Az L-treitol alapú és hasonló szerkezetű katalizátorok több esetben jelentős aszimmetrikus indukciót váltottak ki bizonyos Michael-addíciókban és ciklopropángyűrű képződésével járó reakcióban. Számos reakciót valósítottam meg továbbá a csoportunkban korábban előállított leghatásosabb metil- α -D-glükopiranozid egységet tartalmazó katalizátor alkalmazásával. Részletesen vizsgáltam szubsztituált *transz*-kalkonok és dietil-acetoximalonát Michael-addícióját, illetve szubsztituált benzilidén-malonitrilek és dietil-brómmalonát ciklopropángyűrű képződésével járó reakcióját. Összefüggéseket állapítottam meg a szubsztituensek minősége, helyzete és a kiváltott aszimmetrikus indukció mértéke között. A szintézisek során több esetben 90 % vagy annál nagyobb enantiomertisztsággal keletkeztek a megfelelő termékek.

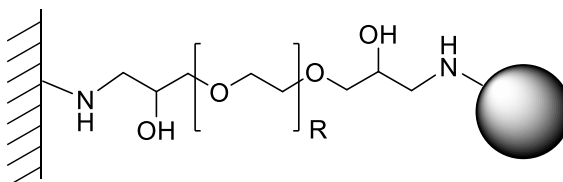
Enzimek kovalens rögzítésére alkalmas szilikagél alapú hordozók fejlesztése biokatalitikus célokra

Suba Szandra, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Poppe László** egyetemi tanár
BME VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Oláh Márk** PhD hallgató
BME VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék.

TDK munkám során kovalens enzimrögzítési módszerekkel foglalkoztam. Szférikus szilikagél alapú hordozók felületének módosításán dolgoztam, mely hordozók alkalmasak célfehérjék kovalens rögzítésére. A Matspheres Innovations cégtől kapott MAT540 szférikus szilikagélt különböző biszepoxidokkal kezeltem, majd ezekhez *Candida antarctica* B lipáz (CaLB) enzimet rögzítettem. A biokatalizátorok aktivitását a racém 1-feniletanol kinetikus rezolválásában vizsgáltam, a reakciókat királis állófázisú gázkromatográfiával követtem.

Célunk volt, egy biokatalitikus célokra hatékonyan alkalmazható, stabil és újrafelhasználható készítményeket fejlesszünk. Saját biokatalizátorainkat kereskedelmi forgalomban kapható készítményekkel (Chiral Vision®, CV T2-150; Novozym® 435) és korábbi kovalens enzimrögzítési technikákkal (glutáraldehid) hasonlítottuk össze.



Hatékonyan valósítottunk meg kinetikus rezolválási kísérleteket szakaszos és folytonos üzemű átfolyásos rendszerekben, illetve a készítményeink stabilitását visszaforgatási kísérletekben (10 kör) vizsgáltuk.

Eredményeink szinte minden esetben felülmúlták a kereskedelmi, polimer alapú (CV T2-150) és a glutáraldehiddel előállított hordozóval elért értékeket, mind a produktivitás, mind az enantio-szelektivitás tekintetében.

Új típusú fluoreszcens nukleotidszenzorok szintézise és spektroszkópai vizsgálata

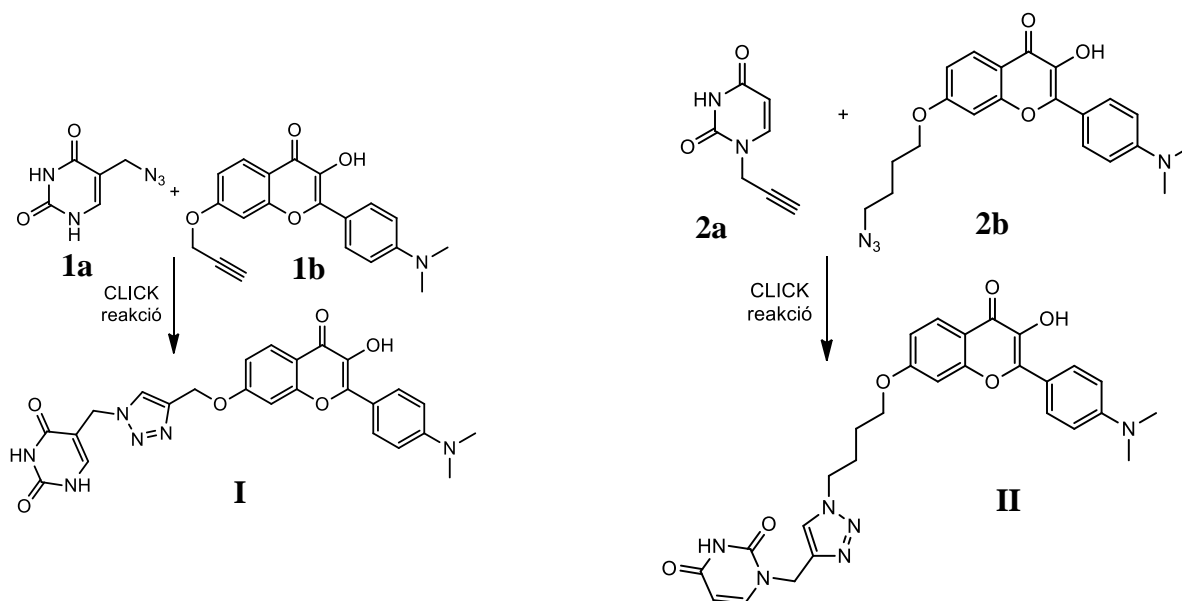
Janzsó-Berend Péter Zoltán, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Bitter István** ny. egyetemi tanár
BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék

Konzulens: **Bojtár Márton Gáspár** PhD hallgató
BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék

A 3-hidroxikromonok a gerjesztett állapotú belső protonátadás (*excited state internal proton transfer*, ESIPT) jelenségét mutatják, mely két emissziós sávot hoz létre (N^* és T^*) a spektrumban. Ennek a tulajdonságnak köszönhetően hasznosnak bizonyulhatnak a fluoreszcenciás érzékelésben és leképezésben. Továbbá némely származékuk jelentős fluoreszcencia-választ mutat ATP (adenozin-5'-trifoszfát) hatására.

Kutatásunkban olyan új típusú nukleotid kemoszenzorokat terveztünk, melyekben egy fluoreszcens 3-hidroxikromon egységhez egy nukleinbázist kapcsoltunk, hogy kihasználva a komplementer bázispárok elvét, növeljük a vegyület szelektivitását és a komplexképzés erősségét. Előállítottuk az uracilt tartalmazó **I** és **II** molekulát az 5-azidometiluracil (**1a**) és a megfelelő propargiloxi-hidroxikromon vegyület (**1b**), valamint az *N*-propargiluracil (**2a**) és az azidobutil-hidroxikromon (**2b**) „click”-reakciójával.



Spektroszkópai vizsgálataink alapján **I** és **II** „turn-on” fluoreszcencia választ ad ATP és kisebb mértékben ADP (adenozin-5'-difoszfát) jelenlétében, míg GTP (guanozin-5'-trifoszfát), AMP (adenozin-5'-monofoszfát) és adenzin hatására nem észleltünk számottevő változást a spektrumban.

Regioszelektivitás vizsgálata acetofenon-ketálok metallálási reakcióiban

Németh András, BSc IV. évf.

Témavezetők: Nyulasi Bálint hatóanyag eljárásfejlesztési laborvezető

Egis Gyógyszergyár Zrt.

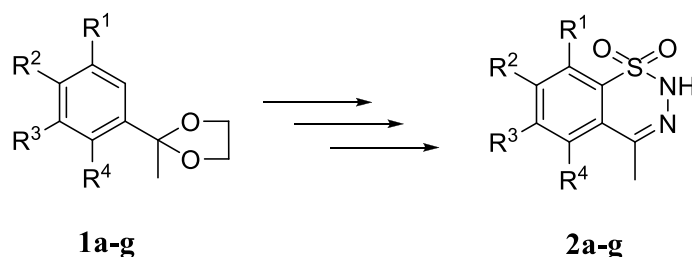
Dr. Kupai József MTA posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Tudományos diákköri munkám során acetofenon–ketálok metallálási reakcióban történő aromás származékképzését valósítottam meg *N,N,N',N',N''*-pentametildietiléntriámin (PMDTA) komplexképző jelenlétében. Míg butil-lítiummal, komplexképző nélkül a dioxolán csoport melletti, *orto*-helyzetben lítiálódott a molekula, addig PMDTA komplexképzővel ettől eltérő, az egyéb szubsztituensek melletti pozícióba sikerült metallálni a modellvegyületeket (1. ábra). Az aril-lítium származékokat szárazjégre öntve, a kapott **1a–g** karbonsavakat kinyerve és karakterizálva vizsgáltam a metallálás regioszelektivitását.



1 vagy 2	R¹	R²	R³	R⁴
a	Cl	COOH	H	H
b	Cl	Cl	COOH	H
c ¹	Cl	COOH	H	Cl
c ²	Cl	H	COOH	Cl
d	Cl	Cl	COOH	Me
e	OMe	COOH	H	H
f	OMe	OMe	COOH	H
g	H	OMe	COOH	H

1. ábra

A termékeket a benzo[1,2,3]tiadiazin-1,1-dioxid származékok előállítására tervezzük alkalmazni (**2a–g**, 1. ábra), ugyanis ezen vegyületcsalád egyes képviselői biológiai aktivitást mutató, a központi idegrendszerre ható, elsősorban szorongásoldó hatású vegyületek.

Új diarilfoszfinsav egységet tartalmazó koronaéterek szintézise és a szubsztituensek hatásának vizsgálata a savi disszociációs állandókra

Szentjóni Hajnalka, MSc I. évf.

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Tóth Tünde egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulensek: **Dr. Balogh György Tibor** osztályvezető, címzetes egyetemi docens

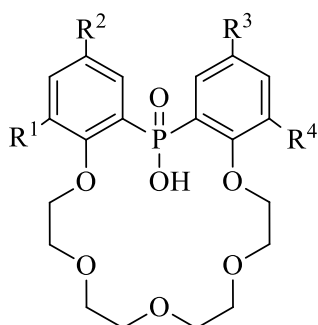
Richter Gedeon Nyrt. Szintézistámogató Laboratórium

Szabó Tamás PhD hallgató

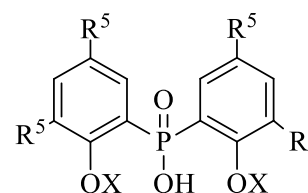
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A deprotonálható koronaéterek képesek megvalósítani az ún. anion nélküli transzportot, mely során a koncentrációgradiens ellenében szállíthatnak fém, illetve ammóniumionokat. Ezen tulajdonságuk révén számos területen alkalmazzák őket. A transzportfolyamatokban a deprotonálható makrociklus ionokat jól, illetve rosszul komplexáló formáját legkönnyebben a közeg pH-jának változtatásával hozhatjuk létre reverzibilisen, ezért elengedhetetlen ismernünk a transzportot megvalósító ligandumok pK_a értékeit.

Kutatócsoportunkban korábban vizsgálták a koronagyűrűn hosszú lipofil szénlánccal rendelkező, diarilfoszfinsav egységet tartalmazó, enantiomertiszta deprotonálható koronaéterek transzportfolyamatokban való alkalmazását. Munkám során ezen lipofil makrociklusok szerkezetével hasonló, de akirális koronaéterek előállítását valósítottam meg, ugyanis ezen makrociklusok pK_a értékét a gyűrűhöz kapcsolódó lipofil szénlánc számottevően nem befolyásolja, azonban a gyűrűn szubsztituálatlan koronaéterek pK_a értékének mérését jelentősen megkönnyíti azok jobb vízoldékonysága.



- 1: $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 = H$
- 2: $R^1 = H, R^2 = R^3 = tBu, R^4 = H$
- 3: $R^1 = NO_2, R^2 = R^3 = tBu, R^4 = NO_2$
- 4: $R^1 = H, R^2 = R^3 = NO_2, R^4 = H$
- 5: $R^1 = H, R^2 = NO_2, R^3 = H, R^4 = H$
- 6: $R^1 = R^2 = R^3 = NO_2, R^4 = H$
- 7: $R^1 = R^2 = R^3 = R^4 = NO_2$



- 8: $R^5 = H, X = H$
- 9: $R^5 = H, X = CH_3$
- 10: $R^5 = NO_2, X = CH_3$

Sikeresen szintetizáltam egy, az irodalomban korábban már ismert (1), illetve hat, korábban még nem közölt (2-7) diaril-foszfinsav egységet tartalmazó, deprotonálható koronaétert, ezen kívül előállítottam három a koronaéterekkel analóg szerkezetű diarilfoszfinsav-származékot (8-10) is. Ezen vegyületek pK_a értékének meghatározása lehetővé tette az aromás gyűrűn lévő szubsztituensek valamint a koronagyűrű jelenléte és a foszfinsav savassága közötti mélyebb összefüggések feltárását.

Alkil-fenil-*H*-foszfinátok előállítása és felhasználása foszfa-Mannich-reakciókban

Tóth Regina Eszter, MSc II. évf.

Témavezetők:

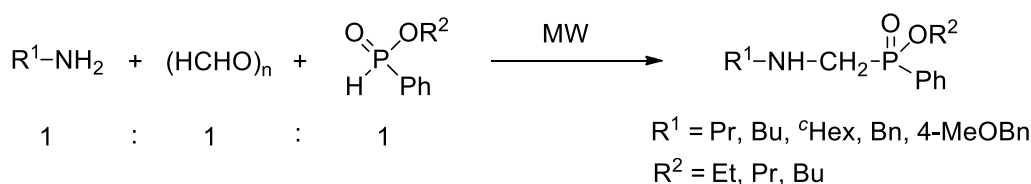
Dr. Bálint Erika tudományos munkatárs

MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport

Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

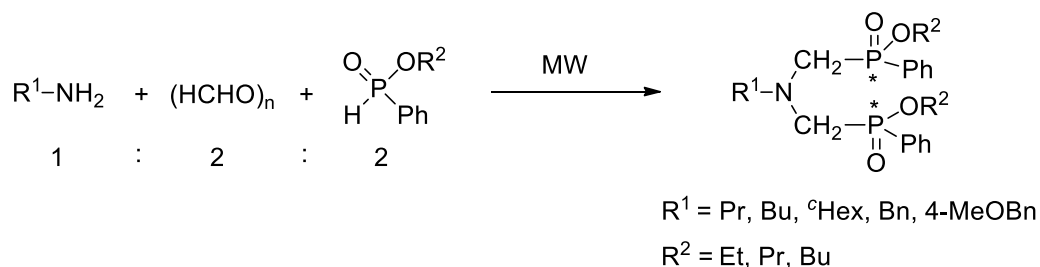
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Szerves Kémia és Technológia Tanszék foszforkémiai és környezetbarát szintézisekkel foglalkozó kutatócsoportjában már régebb óta tanulmányozzák a Kabachnik-Fields (foszfa-Mannich) reakciót. A kondenzációk eredményeképpen α -aminofoszfonátok, illetve származékaik képződnek, melyek az α -aminosavak foszfor-analogonjainak tekinthetők, és potenciális biológiai aktivitással rendelkezhetnek. Kutatómunkám során különböző primer aminok, paraformaldehid és alkil-fenil-*H*-foszfinátok foszfa-Mannich-reakcióját vizsgáltuk. A kondenzációkat mikrohullámú körülmények között, katalizátor és oldószer nélkül kívántuk végrehajtani. Először egyszeres foszfa-Mannich-reakciókat valósítottunk meg. A kondenzációk során primer aminokat reagáltattunk ekvivalens mennyiségű paraformaldehiddel és alkil-fenil-*H*-foszfinátokkal.



A főreakció mellett egy *N*-metilezési mellékreakcióra is felfigyeltünk.

Kutatásaink során bisz(foszfa-Mannich)-reakciókat is tanulmányoztunk. Ebben az esetben a primer aminokat kétszeres feleslegben vett paraformaldehiddel és alkil-fenil-*H*-foszfináttal reagáltattuk.



Célunk a keletkező új α -aminofoszfinátok és biszaminofoszfinátok kipreparálása volt, valamint az új vegyületek szerkezetazonosítása.

1-Fenilpirrol összekötőelemet tartalmazó, DSSC típusú napelemben alkalmazható szerves festék előállításának tanulmányozása

Varga Bálint, BSc IV. évf.

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

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Mátravölgyi Béla tudományos munkatárs

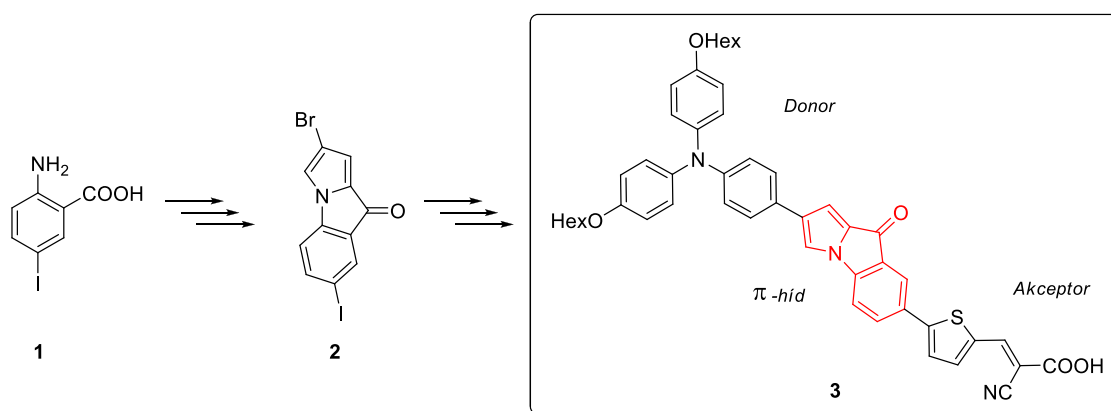
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport

Konzulens: **Hergert Tamás** PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az elmúlt évszázadban az energiafelhasználás rohamosan növekedett, legfőképp a fosszilis energiaforrásokra támaszkodva. A források várható kimerülésével egyre több figyelem fordul a megújuló energiák felé. Ezek közül is az egyik legnagyobb potenciállal a Nap sugárzását elektromos energiává alakító napelemek rendelkeznek. Más megújuló energiaforrás-hasznosítási technológiákhoz viszonyítva a hagyományos fél-vezetős napelemek költséges előállítása azonban számottevő hátrányt jelent számukra, azonban valóban megújuló energiaforrás lévén igen nagy az érdeklődés irántuk. A napelemek területén nagy áttörést jelentett az úgynevezett Grätzel-cella,¹ melynek működése egy fémtartalmú szerves komplexmolekulán alapul. A festékekkel érzékenyített napelemek új kutatási iránya a hatékony, de fémmentes szerves festékmolekulák előállításának vizsgálata.² Az ilyen szerves vegyületekből előállítható napelemek elsősorban várható alacsony árak és széleskörű felhasználhatóságuk miatt mára már igen jelentős kutatási terület.

Kutatómunkám során 1-fenilpirrol összekötőelemet (π -híd) tartalmazó szerves festékmolekula (**3**) előállítását tanulmányoztam. Célom a dihalogenid (**2**) szintézise jódantranilsavból (**1**) és a halogénatomok szelektív átalakításának vizsgálata C–C kapcsolással, a reakciók megfelelő átmenetifém-katalizátorainak, körülményeinek optimalizációja volt.



1. O'Regan, B.; Grätzel, M.: *Nature* **1991**, 353, 737.

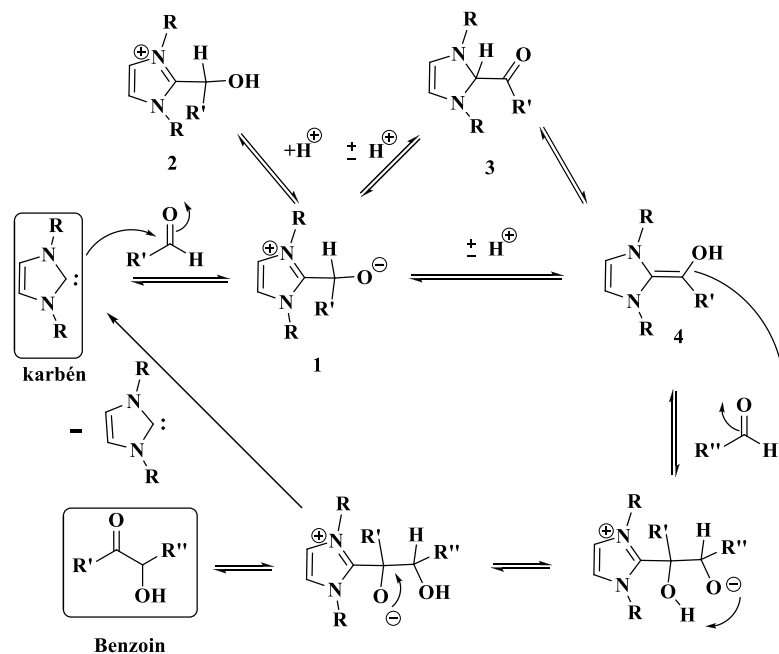
2. Mishra, A.; Fischer, M. K. R.; Bäuerle, P.: *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 48, 2474.

„A Breslow-intermediér nyomában”

Elek Gábor Zoltán, MSc. II. évf.

Témavezető: **Kelemen Zsolt** tudományos segédmunkatárs
 BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Konzulens: **Dr. Nyulászi László** egyetemi tanár
 BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A nitrogénheterociklusos karbének (NHC) különleges elektronszerkezetük miatt képesek megváltoztatni bizonyos molekulák szokásos polarizációs viszonyait, így stabilizálva vagy éppen aktiválva azokat, ezáltal akár katalitikus ciklusokat létrehozva. A leggyakrabban tárgyalt ilyen reakció az aldehidek kondenzációja, melynek mechanizmusát az **1. ábra** mutatja be. A reakció kulcsintermediere az inverz reaktivitással rendelkező ún. Breslow-intermediér (**4**), amelyben az eredetileg δ^+ karbonil szénatom δ^- -vá válik, így képes reakcióba lépni egy másik elektrofillal. Noha a reakció mechanizmusát nehéz elképzelni a Breslow-intermediér nélkül, mindezidáig nem sikerült egyértelműen kimutatni létezését. A reakció körülményektől függően **4** helyett annak protonált formáját (**2**), illetve oxotautomerjét (**3**) sikerült eddig kimutatni. Munkám során DFT számításokkal és kísérleti úton vizsgáltam fenti mechanizmus részletesebb megértését, vizsgáltam a közeg bázikusságának, az oldószer és a karbén forrás típusának hatását a reakció mechanizmusára.



1. ábra: A karbén katalizált benzoin kondenzáció mechanizmusa

Optikailag aktív [1,1'-bifenil-2-il]-1*H*-pirrol származékok előállítása

Szabó Zita, BSc IV. évf.

Témavezető: **Dr. Faigl Ferenc** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Thurner Angelika** tudományos főmunkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

TDK munkám során bifenilpirrolból kiindulva különböző optikailag aktív, gyűrűs és nyílt szénláncú aminoalkohol származékokat állítottam elő. Az intermedierként előállított királis monoészter-származék szabad karboxilcsoportját savamiddá alakítottam, majd az észtercsoportot fenil-magnézium-kloriddal reagáltatva képeztem a terciér alkoholt. Az amidcsoport redukciója után kapott aminolcoholt királis ligandumként alkalmaztam dietil-cink és benzaldehid addíciós reakciójában.

α -Aminofoszfín-oxidok szintézise és P-ligandumként történő felhasználása

Tripolszky Anna, MSc. 1. évf.

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

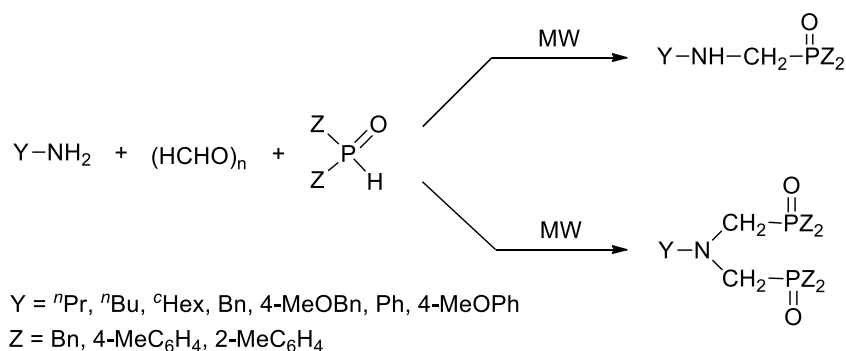
MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport

Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia tanszék

Napjainkban az α -aminofoszfín-oxidok kutatási területe egyre inkább előtérbe kerül, melynek oka az α -aminofoszfónát analógok potenciális bioaktivitása. Emellett bizonyos származékaik P(III)-ligandumként is felhasználhatók.

Kutatómunkánk során szekunder különböző foszfín-oxidokat állítottunk elő, majd a vegyületeket egyszeres és kétszeres Kabachnik–Fields-reakciókban hasznosítottuk. Míg az előbbi esetben a primer aminokat egy ekvivalens paraformaldehiddel és egy ekvivalens szekunder foszfín-oxiddal kondenzáltattuk, addig a kétszeres Kabachnik-Fields reakcióik során az aminokat kétszeres feleslegben vett paraformaldehiddel és P-reagenssel reagáltattuk. A kondenzációkat katalizátor nélkül, mikrohullámú körülmények között valósítottuk meg.



Tanulmányozni kívántuk a képződő bisz-termékek P-ligandumként való felhasználhatóságát, így a bisz(foszfinoilmetil)-aminokból kétszeres deoxigénezést követően, platina- és palládium-komplexeit képeztünk. A kapott gyűrűs platina-komplexeik katalitikus aktivitását a sztirol hidroformilezési reakciójában teszteltük.

