



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA



2024

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

A szekcióülések kezdete: 2024. november 21. 8:30

Eredményhirdetés: 2024. november 21. 18:00

Ch. C14. terem

A BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán rendezett
2024. évi Tudományos Diákköri Konferenciát
támogatták:

BME Rektori Hivatal

BME VBK Dékánja és a Varga József Alapítvány

BME Egyetemi Hallgatói Képviselő

Pro Progressio Alapítvány

Dr. Pungor Ernő családja

Eurofins BioPharma Product Testing Hungary Kft.

LabCup Ltd.

Richter Gedeon Nyrt.

Egis Gyógyszergyár Zrt.

EUROAPI Hungary Kft.

MOL Nyrt.

Magyar Kémikusok Egyesülete

BME VEGY-ÉRTÉK Tehetségpont



Az NTP-HHTDK-24-0054 számú pályázat támogatásával megvalósuló program.

Időpont	Analitikai kémia szekció Ch. 308.	Anyagtudomány és fizikai kémia szekció K. 134.	Biokémia és élelmiszertudományi szekció Ch. 201.	Kémiai és biotechnológia szekció Ch. A10.	Szerves kémia szekció Ch. C14.	Időpont
8:30–8:45	Bakucz Liliána Gyöegyi	Altsach Vivien Barbara	Cs. Nagy-Lászlóffy Júlia	Demeter Kincső Renáta	Bednárk Janka	8:30–8:45
8:45–9:00	Balogh Marcell János	Antal Balázs	Donáth András	Fekete Dániel	Gerő Viktória	8:45–9:00
9:00–9:15	Kállai Balázs Zsolt	Bors Adrienn Márta	Kozma Bianka	Hegyi Mihály	Bircher Márton Áron	9:00–9:15
9:15–9:30	Gál Zalán	Huszka Szabolcs	Kerényi Kornél	Kálnai Áron	Cseh Orsolya Zsuzsanna	9:15–9:30
9:30–9:45	Bartak Máté	Magyari Benedek	Kocsis Boglárka	Molnár Bence Csaba	Gémes Gergő	9:30–9:45
9:45–10:00			SZÜNET			9:45–10:00
10:00–10:15	Kis-Tóth Bálint	Stummer Tamás	Iván Réka Boglárka	Pátkai Tamás	Bese Cintia	10:00–10:15
10:15–10:30	Zsejki Boglárka	Szayly Kata	Szajkó Milda Blanka	Spátay Sára	Jakab Máté	10:15–10:30
10:30–10:45	Molnár Alexandra	Hou Yufei	Szentirmai Anna	Szeip Judit	Unyi Zsombor	10:30–10:45
10:45–11:00	Márkus Eszter	Úr Attila	Tóth Máté	Zrinyi Anna	Kisfaludi Péter	10:45–11:00
11:00–11:15	Kertesi Csongor, Zsigmond Levente	Borbás Balázs	Ujvári Kamilla	Benczúr Máté Gergő	Mócza Levente András	11:00–11:15
11:15–11:30			SZÜNET			11:15–11:30
11:30–11:45			Gasparics Kata		Szabó Bence	11:30–11:45
11:45–12:00			Horváth Virág Nikolett			11:45–12:00
12:00–12:15			Szabó Katalin			12:00–12:15
12:15–12:30						12:15–12:30
12:30–12:45						12:30–12:45

Elnök: **Dr. Nyulászi László** egyetemi tanár, az MTA levelező tagja
Titkár: **Mátyási Judit** kutatómérnök
Koordinátorok: **Dr. Simon András** egyetemi docens
Dr. Szieberth Dénes egyetemi docens
Külső tag: **Dr. Tolokán Antal** egészségvédelmi üzletágvezető
Eurofins BioPharma Product Testing Hungary Kft.

Helyszín: **Ch. 308.**

8:30 Bakucz Liliána Györgyi

Amorf szilárd diszperziós készítmények hatóanyag-tartalmának meghatározása UV-képelemzéssel

Témavezetők: Dr. Szabó Edina tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Mészáros Lilla Alexandra tudományos segédmunkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Péter-Haraszti Anna PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:45 Balogh Marcell János

Karbonszilolok fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata – két AIE-aktív csoport egy csárdában?

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

9:00 Kállai Balázs Zsolt

Potenciometriás ionszelektív mikroelektrodok fejlesztése vízminták baktériumtartalmának meghatározására

Témavezetők: Dr. Gyurcsányi E. Róbert egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Papp Soma egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

9:15 Gál Zalán

Szénhidrátkeverékek vizsgálata csomagolóanyagokon keresztül NIR-spektrofotometriával

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

9:30 Bartek Máté

Erős vagy gyenge, egyáltalán létezik? Heterobimetallikus kölcsönhatás vizsgálata κ^3 -bisz(donor)ferrocén-átmenetifém komplexekben

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

9:45 Szünet

10:00 Kis-Tóth Bálint

Kovalensen módosított mikrotálca alapú fluoreszcens optoszenzor fejlesztése cink- és ólomionok nagy áteresztőképességű analízisére

Témavezetők: Dr. Tóth Tünde habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Golcs Ádám posztdoktor
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Zsejki Boglárka

Illóolaj-tartalmú gyógyszeres tapaszok fejlesztése, vizsgálata

Témavezető: László Szabolcs tudományos segédmunkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:30 Molnár Alexandra

Alternatív proteomikai mintaelőkészítési módszerek különböző biológiai minták vizsgálatához

Témavezetők: Dr. Turiák Lilla tudományos főmunkatárs
HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport
Balbisi Mirjam tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport

10:45 Márkus Eszter

Ioncserés kromatográfiás oszlopok minősítése és adalimumab fehérje tisztításának optimalizálása

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

11:00 Kertesi Csongor, Zsigmond Levente

Levegődiszperziós modellezés validálása telepített mérőállomásokkal

Témavezető: Gógh Zsolt felkészítő tanár
Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Technikum

Elnök: **Dr. Jedlovszky Pál** egyetemi tanár
Titkár: **Lőrincz Balázs** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Imre Balázs** egyetemi adjunktus
Dr. Szolnoki Beáta egyetemi adjunktus
Külső tag: **Dr. Meiszel László** BME Ipari Professzor

Helyszín: **K. 134.**

8:30 Altsach Vivien Barbara

HKUST-1@grafénszármaszék társított rendszerek morfológiai jellemzése

Témavezető: **Dr. László Krisztina** Professor Emerita
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

8:45 Antal Balázs

Szén-dioxid hidrogénezés gallium-nikkel klasztereken

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

9:00 Bors Adrienn Márta

Ezüsttel adalékolt TiO₂ szol-gél bevonatok fényáteresztése és fotokatalitikus hatása

Témavezető: **Dr. Albert Emőke** egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

9:15 Huszka Szabolcs

Különböző összetételű poliszacharid/nanocellulóz gélek előállítása és jellemzése

Témavezető: **Dr. Fekete Erika** tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

9:30 Magyarai Bendedek

Önlebomló poli(ϵ -kaprolakton) kompozitok

Témavezető: **Dr. Hegyesi Nóra** tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
HUN-REN TTK AKI Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport

9:45 Szünet

10:00 Stummer Tamás

Diamino-oxidáz nanoszálás formulációja innovatív terápiák kifejlesztéséhez

Témavezető: **Dr. Balogh-Weiser Diána** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Szayly Kata

Mukoadhézió jellemzése hidrogél felszínen húzó és nyíró igénybevétel alkalmazásával

Témavezető: Dr. Gyarmati Benjámint egyetemi docens
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

10:30 Huo Yufei

Virtuális vegyületek a szerves félvezetők fejlesztői számára

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

10:45 Ur Attila

Csontpótlásra szánt politejsav kompozitok felületkezelése enzimes degradáció segítségével

Témavezető: Renkeczné Dr. Tátraaljai Dóra tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

11:00 Borbás Balázs

Felkonvertáló nanorészecskék kompozit vékonyrétegei: emissziós intenzitás és energiaátadási folyamatok jellemzése

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

Elnök: **Dr. Salgó András** Professor Emeritus
Titkár: **Telek András** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Kelemenné Dr. Nagy Kinga** egyetemi adjunktus
Dr. Németh Áron egyetemi docens
Dr. Wunderlich Livius egyetemi adjunktus
Külső tag: **Dr. Kállai Brigitta** egyetemi adjunktus
SE ÁOK Molekuláris Biológiai Tanszék

Helyszín: **Ch. 201.**

8:30 Cs. Nagy-Lászlóffy Júlia

A teljes bifunkciós NDST3 heparán-szulfát bioszintézis enzim rekombináns előállítása

Témavezető: Dr. Nagy Gergely Nándor egyetemi tanársegéd
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

8:45 Donáth András

Gluténfehérjék és fermentált oligo-, di-, monoszacharidok és polioloak vizsgálata kovászolás során

Témavezető: Muskovics Gabriella PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

9:00 Kozma Bianka

A dUTPáz-fehérje-kölcsönható partnereinek azonosítása és szerepének vizsgálata egérembrío-modellben

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

9:15 Kerényi Kornél

3-Kimotripszin típusú SARS-CoV-2-proteáz biomolekuláris inhibíciója

Témavezető: Prof. Dr. Nagy Péter tudományos igazgató
Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológiai és
Toxikológiai Osztály
Dr. Lopata Anna vegyész
Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológiai és
Toxikológiai Osztály

9:30 Kocsis Boglárka

Különböző donorokból származó mesenchymális őssejtek immunszuppresszív képességét összehasonlítható módon mérő tesztrendszer beállítása

Témavezető: Dr. Kajdácsi Erika biológus
Simmelweis Egyetem, Hematológiai Klinika, Kutatólabor

9:45 Szünet

10:00 Iván Réka Boglárka

Az NDST3-N-szulfotranszferáz doménjének rekombináns előállítás és biokémiai vizsgálata

Témavezető: Dr. Nagy Gergely Nándor egyetemi tanársegéd
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

10:15 Szajkó Milda Blanka

Genomi uracilmintázatok jellemzése: szenzorfejlesztés és funkcionális elemzés embrionális fejlődési modellben

Témavezetők: Dr. Békési Angéla egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
HUN-REN TTK Molekuláris Élettudományi Intézet

10:30 Szentirmai Anna

Oxidatív stressz kiváltotta sejthalál útvonalak vizsgálata tumoros sejtekben

Témavezető: Dr. Szarka András egyetemi tanár
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

10:45 Tóth Máté

A sejtciklus során stabil mRNS-expresszióval rendelkező referenciagének vizsgálata

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

11:00 Újvári Kamilla

A biofilmképződésben szerepet játszó jelátvivőmolekulák antimikrobiális peptidokkal képzett szupramolekuláris asszociátumai

Témavezetők: Dr. Szigyártó Imola Csilla tudományos munkatárs
HUN-REN TTK AKI Biomolekuláris Önrendeződés Kutatócsoport
Dr. Beke-Somfai Tamás tudományos főmunkatárs
HUN-REN TTK AKI Biomolekuláris Önrendeződés Kutatócsoport

11:15 Szünet

11.30 Gasparics Kata

Mélyhűtött sütőipari termékek minőségjavításának lehetőségei

Témavezetők: Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi tanszék
Dr. Jaksics Edina tudományos segédmunkatárs
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi tanszék

11:45 Horváth Virág Nikolett

Extracelluláris vezikulák glikomikai karakterizálása

Témavezetők: Dr. Turiák Lilla tudományos főmunkatárs

HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport

Balbisi Mirjam tudományos segédmunkatárs

HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport

12:00 Szabó Katalin

Gyógyszerindukált neuropszichiátriai mellékhatások sejtszintű mechanizmusának vizsgálata humán monocita sejtmodellen

Témavezető: Dr. Onódi Zsófia egyetemi adjunktus

SE Farmakológiai és Farmakoterápiás Intézet

Elnök: **Dr. Szilágyi Botond** egyetemi docens
Titkár: **Do Thi Huyen Trang** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Decsi Balázs** egyetemi adjunktus
Dr. Farkas Tivadar egyetemi adjunktus
Külső tag: **Dr. Urbányi Zoltán** biológikum fejlesztési igazgatója
VRG Therapeutics Zrt., az MKE alelnöke

Helyszín: **Ch. A10.**

8:30 Demeter Kincső Renáta

Szemcseméret valós idejű meghatározása pelletretegezés során gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Témavezető: Dr. Galata Dorián László tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:45 Fekete Dániel

Mesterséges neurálisháló-alapú modell fejlesztése granulátumok nedvességtartalmának in-line nyomon követésére

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

9:00 Hegyi Mihály

Félfolyamatos neutrális hidrolitikus eljárás fejlesztése PET kémiai újrahasznosítására

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

9:15 Kálnai Áron

Porkeverék komponensenkénti szemcseméret-eloszlásának meghatározása gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Témavezető: Dr. Galata Dorián László tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:30 Molnár Bence Csaba

Klomipramin kulcsintermedier szintézisút és technológia fejlesztése

Témavezető: Dr. Szabó Tamás kutatási és fejlesztési igazgató
SONEAS Vegyipari Kft.
Dr. Orha László kutatási és fejlesztési csoportvezető
SONEAS Vegyipari Kft.

9:45 Szünet

10:00 Pákai Tamás

Eukaliptol, mint biomassza-alapú oldószer, alkalmazása Sonogashira-reakcióban

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

10:15 Spátay Sára

Mikrotálcák PVDF-szűrőmembránjának kémiai funkcionálizálása

Témavezetők: Dr. Tóth Tünde habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Golcs Ádám posztdoktor
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:30 Szeip Judit

Probiotikus kakaópor készítmény előállítás folyamatos üzemű granulálási technológiával

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

10:45 Zrinyi Iлона

Szelektív szol-gél enzimrögzítési eljárások fejlesztése mágneses nanorészecskékre

Témavezető: Dr. Bell Evelin egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:00 Benczúr Máté Gergő

Porkeverékek összetételének és komponensenkénti szemcseméret-eloszlásának vizsgálata valós időben gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Témavezető: Dr. Galata Dorián László tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ

Elnök: **Dr. Poppe László** egyetemi tanár
Titkár: **Kollár Levente** doktorjelölt
Koordinátor: **Dr. Balogh Diána** egyetemi adjunktus
Dr. Ábrányi-Balogh Péter tudományos főmunkatárs, c. egyetemi docens
Külső tag: **Dr. Éles János** főosztályvezető-helyettes, Richter Gedeon Nyrt.

Helyszín: **Ch. C14.**

8:30 Bednár Janka

Biszfoszfonát-származékok szintézise α -halogeno- vagy metánszulfoniloxi-benzilfoszfonátokból

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

8:45 Gerő Viktória

(1,2,3-Triazol-4-il)metil-foszforamidát-származékok előállítása azid-alkin-cikloaddícióval

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

9:00 Bricher Márton Áron

α -Aminofoszfonátok előállítása és módosítása foszforilezéssel

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

9:15 Cseh Orsolya Zsuzsanna

Ciklodextrinhez rögzített szénhidrátalapú koronaéterek szintézise

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

9:30 Gémes Gergő

Organo-fotokatalitikus rendszerek alkalmazása C-alkilezési reakciók fejlesztésére

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

9:45 Szünet

10:00 Bese Cintia

α -Hidroxi-benzilfoszfonátok reakciója dialkil-acetiléndikarboxiláttal

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

10:15 Jakab Máté

Monobenzo-pentalén kromofórok szerkezeti hangolása fotovoltaiikus alkalmazásokhoz

Témavezetők: Dr. London Gábor tudományos főmunkatárs, csoportvezető
HUN-REN TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport
Meiszter Enikő PhD-hallgató
HUN-REN TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport

10:30 Unyi Zsombor

Aktiválható, makrociklusos tetrazinok szintézise

Témavezető: Dr. Cserép Balázs Gergely tudományos munkatárs
HUN-REN TTK SZKI Kémiai Biológia Kutatócsoport

10:45 Kisfaludi Péter

Egy bisz(akridino)koronaéter a spermin bioszintézis oligoaminjainak felismerésére

Témavezetők: Dr. Tóth Tünde habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Golcs Ádám posztdoktor
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:00 Mócza Levente András

Potenciális gyógyszer-intermedierek aszimmetrikus szintézise prokirális ketonokból enzimátikus módon

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

11:15 Szabó Bence

Fotoaktiválható idegnövekedési faktor mimetikumok szintézise és fotokémiai vizsgálata

Témavezető: Dr. Cseri Levente szenior vegyész
BrainVisionCenter Nonprofit Kft.
Dr. Kupai József habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A DOLGOZATOK ÖSSZEFOGLALÓI

Amorf szilárd diszperziós készítmények hatóanyag-tartalmának meghatározása UV-képelemzéssel

Bakucz Liliána Györgyi, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Szabó Edina** tudományos munkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Mészáros Lilla Alexandra tudományos segédmunkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Péter-Haraszti Anna PhD-hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszerkészítmények állandó, magas minőségének garantálása a gyógyszeripar számára kiemelkedően fontos. Az egyik legjelentősebb kritikus minőségi jellemző a gyógyszerkészítmények hatóanyag-tartalma, melynek vizsgálatára gyakran alkalmazott analitikai módszerek az UV-spektrofotometria és a nagy teljesítményű folyadékkromatográfia (high-performance liquid chromatography, HPLC). Ezek hátránya azonban, hogy roncsolásos technikák, így a vizsgált minták nem nyerhetők vissza a mérést követően. Emiatt pedig általában az iparban a teljes sarzsából csupán néhány mintát tesztelnek és abból következnek a többi termék minőségére. A felsorolt limitációk miatt manapság a roncsolásmentes vizsgálatok egyre több teret nyernek a gyógyszeriparban. A hatóanyag-tartalom mérések eseténpéldául a közeli infravörös (near infrared, NIR) vagy a Raman-spektroszkópiás módszerek lehetnek ígéretes roncsolásmentes eljárások. Ezek hátránya, hogy magas a beszerzési és fenntartási költségük, ezért megfontolandó olyan egyéb nem destruktív, kisebb költségű módszerek fejlesztése, amelyek hatékonyan képesek az említett jellemző vizsgálatára.

Kutatómunkám során egy ilyen módszer kifejlesztésén dolgoztam. A módszerfejlesztést elektrosztatikus szálképzéssel előállított, amorf szilárd diszperziós gyógyszerkészítmények hatóanyag-tartalom mérésére optimalizáltam. Az újonnan felfedezett kismolekulás hatóanyagok, valamint a már a piacon elérhető gyógyszerhatóanyagok jelentős részének ugyanis rossz a vízdoldhatósága, ezért az ilyen hatóanyagok kioldódásának javítására lehetséges megoldás lehet az amorf szilárd diszperziós készítmények fejlesztése. A pontos hatóanyag-tartalom biztosítása és meghatározása ezeknél a készítményeknél is létfontosságú. Kutatómunkám céljául egy olyan többváltozós adatelemzéssel kombinált, UV-fényforrást alkalmazó képelemzési módszer létrehozását tűztem ki, amely amorf szilárd diszperziók hatóanyag-tartalmának gyors, költséghatékony és roncsolásmentes elemzésére képes. Kutatásom célkitűzése volt még, hogy vizsgáljam szakaszos és folyamatos homogenizálás után préselt tabletták esetén is a módszer alkalmazhatóságát.

Karboranilszilolok fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata – két AIE-aktív csoport egy csárdában?

Balogh Marcell János, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Kelemen Zsolt** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Konzulens: **Szathmári Balázs** PhD-hallgató
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A szilolok¹ és a karboránvegyületek² értékes tulajdonsága, hogy oldatban fluoreszkálnak, de ami még különlegesebbé – és alkalmazás szempontjából érdekesebbé – teszi őket, hogy AIE-jelenséget (aggregáció-indukált emisszió) mutatnak, azaz aggregált állapotban nagyobb kvantumhatásfokkal rendelkeznek. Az AIE jelenségének felismerése új utakat nyitott meg optoelektronikai alkalmazás szempontjából, hiszen olyan vegyületcsaládok kerültek a tudományos érdeklődés középpontjába, amelyekről korábban elkönnyvelték, hogy fotofizikai szempontból nem számítanak különlegesnek. Különbféle szubsztituált és polimerizált szilolokat már alkalmaznak optoelektronikai készülékekben (pl. OLED-ekben).³

Mindezek miatt a két vegyületcsoport összekapcsolásával kapott karboranilszilolok ilyen jellegű fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata nagy potenciállal bír. Karboranilszilolokat első ízben a BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszékén működő Modern Szervetlen Anyagok Kutatócsoport állított elő.

TDK-munkám során feltérképeztem a korábban a kutatócsoportom által sikeresen szintetizált karboranilszilolok optikaitulajdonságait, és összefüggéseket vontam a molekulák szerkezete és fluoreszcenciája között. Továbbá kutatómunkám részeként sikeresen előállítottam két új karboranilszilol vegyületet, amelyek kvantumhatásfokát meghatároztam oldott és aggregált állapotban. A kiindulási vegyületként alkalmazott halogénezett szilolok hidrolízisre hajlamosak, ezért munkám során standard Schlenk-technikát alkalmaztam, szárított nitrogén, illetve argon atmoszférában dolgoztam. A termékek szerkezetének azonosításához NMR-spektroszkópiai méréseket, IR-spektroszkópiát és egykristály-röntgendiffrakciós méréseket alkalmaztam. A reakciók mélyebb megértésére, a mechanizmusok feltérképezésére kvantum-kémiai számításokat végeztem.

[1] Uchida, M. *et al.*; *Chemistry of Materials*, **2001**, *13*, 2680–2683.

[2] Kokado, K.; Chujo, Y; *Macromolecules*, **2009**, *42*, 1418–1420.

[3] Cai, Y.; Qin, A.; Tang, B. Z.; *Journal of Materials Chemistry C*, **2017**, *5*, 7375–7389.

Potenciometriás ionszelektív mikroelektrodok fejlesztése vízminták baktériumtartalmának meghatározására

Kállai Balázs Zsolt, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Gyurcsányi E. Róbert** egyetemi docens, tanszékvezető

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Dr. Papp Soma egyetemi adjunktus

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A különböző felszíni és felszín alatti vizek, illetve esővizek ionos összetételéhez számos fontos minőségi jellemző (pH, keménység, sótartalom és az esetleges műtrágya szennyezésből származó nitráttartalom) kapcsolható. Mérésükre és különösen a valós idejű monitorálására kiválóan alkalmasak a potenciometriás ionszelektív elektrodok. A folyamatos monitorálás gyakorlatilag minden releváns ionra megvalósítható az azonos, rendkívül költséghatékony és könnyen multiplexálható potenciometriás mérési elvnek köszönhetően. Ugyanakkor a vizek egyéb minőségi jellemzőit a helyszínen költségesebben vagy kevésbé gyorsan lehet meghatározni, mint például a kiemelt jelentőségű bakteriális szennyezettség vizsgálata a koliform baktériumok (pl. kólibaktérium – *Escherichia coli*) mennyiségének mérésén keresztül. Különösen előnyös lenne egy olyan gyors baktériummeghatározási módszer kidolgozása, amely kompatibilis az ionszelektív elektrodokkal és a potenciometriás mérés technikával, így lehetőséget ad egy integrált multiplex potenciometriás mérési platform kialakítására. Ennek megfelelően célul tűzttem ki az *E. coli* baktériumok potenciometriás detektálási lehetőségének vizsgálatát.

A koliform baktériumok esetén gyakran alkalmazott technika sejtfeltárást követően a β -galaktozidáz (*GAL*) enzimtartalmukon keresztüli kimutatás. A *GAL* enzim méréséhez a 6,8-difluor-4-metilumbelliferil- β -D-galaktopiranozid (*DIFMUG*) szubsztrátumot választottam, amelyből az enzim hatására olyan lipofil anion keletkezik (7-es, vagy ennél magasabb pH-n) amely szelektíven meghatározható potenciometriás anioncserélő elektróddal a hidrofil szervetlen anionok jelenlétében is.

Első lépésben olyan anionszelektív elektrodokat fejlesztettem, melyek alkalmazhatóak az enzimreakcióban keletkezett *DIFMU*-anionok mérésére. Az anionszelektív membrán összetételének optimalizálását követően a hatékony, kis mintatérfogatban végezhető mérések érdekében az elektrodok miniatürizálására volt szükség. Munkám során ún. *pipettahegy-mikroelektrodokat* készítettem (\varnothing 300 μ m), amelyek lehetővé tették, hogy a méréseket akár egy mikrotiter tálca 250 μ l-es üregeiben végezhessem. A miniatürizált elektrodok lehetőséget adtak az enzimreakciók folyamatos időbeli nyomon követésére is és alkalmasak voltak β -galaktozidáz oldatokban az enzimaktivitás meghatározására akár 0,02 mU szintig. Ezt a mérőrendszert sikerrel alkalmaztuk az *E. coli* jelenlétének kimutatására nem patogén baktérium lizátumokban és kereskedelmi forgalomban kapható probiotikumokban (*LXR Mikrobiom Komplex kapszula*).

Szénhidrátkeverékek vizsgálata csomagolóanyagokon keresztül NIR-spektrofotometriával

Gál Zalán, I. évf. (MSc)

Témavezetők: **Slezsák János** egyetemi tanársegéd

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Dr. Gergely Szilveszter egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A különböző porkeverékek hatékony vizsgálata a legtöbb iparágban kiemelt fontosságú, akár a keverés, mint technológiai lépés ellenőrzése, akár az alap-, segéd- és hatóanyagok vizsgálata során, mivel számos esetben ezek az összetevők nem tiszta komponensek, hanem különböző összetevők keverékei. A közeli infravörös (near infrared, NIR) spektroszkópia – mint nagy áteresztőképességű és roncsolásmentes analitikai módszer – jól alkalmazható erre a célra. A NIR-módszerek alkalmazhatóságát még inkább javíthatja, ha a spektrumokat a csomagolás megbontása nélkül, tehát azokon keresztül végezzük el, kiaknázva a diffúz reflexiós mérés technika lehetőségeit. Kutatásaim során korábbi munkám eredményeit alapul véve különböző szénhidrát modellrendszereket vizsgálok NIR-spektrofotometriával. Méréseimet eltérő optikai elrendezésű készülékekkel végzem, a spektrumokat pedig különböző vastagságú, ipari csomagolástechnikában gyakran alkalmazott fóliákon keresztül veszem fel. A spektrumok sokváltozós adatelemzésen alapuló kiértékelésének célja az, hogy a fóliákon keresztüli mérések zavaró hatását a lehető legjobban sikerüljön kiküszöbölni, és így a kutatás-fejlesztésben és az iparban egyaránt jól használható módszertant dolgozzak ki a porkeverékek csomagolóanyagokon keresztüli NIR mérésére.

Erős vagy gyenge, egyáltalán létezik? Heterobimetallikus kölcsönhatás vizsgálata κ^3 -bisz(donor)ferrocén-átmenetifém komplexekben

Bartek Máté, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kelemen Zsolt** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Konzulens: **Dr. Makkos Eszter** tudományos munkatárs
HUN-REN–BME Számításvezérelt Kémia Kutatócsoport

A fémcentrumok közt kialakuló kötések, valamint egyéb, nem konvencionális kölcsönhatások kiemelt helyet foglalnak el a modern elméleti kémiai kutatásokban. Elméleti jelentőségükön túl az elmúlt évtizedekben a molekuláris fém-fém kötések sajátos tulajdonságait a gyakorlatban is sikerült felhasználni. Az egyes fém centrumok között létrejövő ún. kooperatív effektusok lehetővé teszik, hogy olyan vegyületeket állítsunk elő, amelyek nagyobb katalitikus aktivitással rendelkeznek. A ferrocénegységet tartalmazó katalizátorokat napjainkban széleskörűen alkalmazzák, azonban e vegyületek esetében a bimetallikus kooperáció szerepe még nem vizsgált. Ennek oka a komplexekben létrejövő heterobimetallikus kölcsönhatás pontos karakterizálásának hiánya. Emellett nincs konszenzus azt illetően, hogy az e vegyületcsaládban jelenlévő fém-fém kölcsönhatás direkt datív kötés, valamilyen indirekt datív kölcsönhatás. A fém-fém kooperáció lehetősége nem vizsgálható a heterobimetallikus kölcsönhatás precíz ismerete nélkül.

Emiatt kutatásom során szubsztituált ferrocénszármazékok átmeneti fémekkel alkotott komplexekben jelenlévő heterobimetallikus kölcsönhatás természetét, és erősségét vizsgáltam DFT-módszerek segítségével. Munkám során több elméleti szintet is megvizsgáltam és megállapítottam, hogy a TPSSh-funkcionál a leginkább alkalmas a kísérleti geometria reprodukálására. A def2-TZVP-báziskészlettel a fématomokon vett pseudopotenciálokkal a fém centrumokat érintő relativisztikus effektusokat figyelembe vehetők. Az eltérő fém centrumok (Pd, Ni) hatását a kölcsönhatás jellegét illetően a komplexekhez tartozó alapállapotú hullámfüggvény topológiai vizsgálatával (QTAIM) magyaráztam. A QTAIM-mennyiségek, az atomi mezőkben vett töltések, valamint a fém-fém kötéshossz közti korrelációval megállapítottam, hogy a palládiumkomplexekben lévő Fe–M-kölcsönhatás kovalens karaktere nagyobb, mint a nikkelanalogonoké. A forrásfüggvény vizsgálatával javaslatot tettem a kölcsönhatás indirekt természete mellett. A szubsztituens hatások vizsgálatára számos modellvegyületet tanulmányoztam, amelyekre NBO-számításokat, potenciális energia (hiper)felület szkencet (PES-szken) végeztem, valamint ligandumcsere reakciókkal LNO-CCSD(T)/def2-QZVP//TPSSh/def2-TZVP-számításokkal is vizsgálva javaslatot tettem a kölcsönhatás erősségét illetően. A számítások eredménye konzisztens a kölcsönhatás részleges datív karaktere mellett. Elektronszívó, gyenge donorligandumok megnövelik a kölcsönhatás kovalens jellegét, ezáltal az elektronsűrűséget a kötéskritikus pontban, míg elektronküldő jó donorligandumok esetében ellenkező trendet tapasztalunk.

Kovalensen módosított mikrotálca alapú fluoreszcens optoszenzor fejlesztése cink- és ólomionok nagy áteresztőképességű analizisére

Kis-Tót Bálint, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Tóth Tünde** habil. egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Golcs Ádám posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Prof. Dr. Huszthy Péter** Professor Emeritus, az MTA rendes tagja

Szerves Kémia és Technológia Tanszék.

Ádám Bálint Árpád PhD-hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Zn^{2+} -ionok nagy jelentőséggel bírnak mind a környezet, mind a biológiai szervezetek számára. Az Pb^{2+} -ionok emellett ugyanezek a területeken komoly veszélyt jelentenek erős toxicitásuk miatt. Dolgozatomban bemutatok egy nagy áteresztőképességű optokémiai módszert ezen ionok környezeti- és szennyvízmintákból történő kimutatására. Ezentúl bemutatásra kerül egy új és általánosan alkalmazható háromlépéses eljárás mikrotálcák kémiai funkcionálizálására, mely atmoszférikus plazmakezelést, linker-molekula kötést és fotokatalitikus kopolimerizációt foglal magába. Az kereskedelmi forgalomban elérhető 96 cellájú cikloolefin kopolimer mikrotálcák felületét elsőként atmoszférikus levegőplazmával polarizáltam, majd a cellák aljára metakrilát-tartalmú monomolekuláris réteget vittem fel. Utolsó lépésként az előzetesen kezelt cellákba fotokatalitikus polimerizációval bisz(akridino)-koronaéter-típusú szenzormolekulát rögzítettem kovalens kötésen keresztül. Az elkészült érzékelő eszköztípustól függetlenül alkalmazható mikrotálca olvasóban, valamint integrálható bármely automatizált folyadékkezelő platformmal és lehetőséget teremt óránként több, mint ezer minta monitorozására, mindössze $20 \mu l$ mintaigény mellett. Zn^{2+} - és Pb^{2+} -ionok esetében rendre $8,0 \cdot 10^{-9}$ és $3,0 \cdot 10^{-8} \text{ mol/dm}^3$ kimutatási határérték felett.

Illóolaj-tartalmú gyógyszeres tapaszok fejlesztése, vizsgálata

Zsejki Boglárka, 12. évfolyam (középiskola)

Témavezető: **Dr. László Szabolcs** tudományos segédmunkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A Soproni Széchenyi István Gimnázium tanulójaként kezdtem bele munkámba a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen, ahol már több éve foglalkoznak a transzdermális terápiás rendszerek fejlesztésével és kivizsgálásával. Iskolámban alapoztam meg mind a kémiai, mind a matematikai ismereteket, melyeket a kutatásom során használtam és fejlesztettem az egyetemen.

A BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszékén számos kutatással a hátuk mögött rengeteg lehetőséget biztosított számomra egy eredményes munka létrejöttéhez, ugyanis ezen tapaszok fejlesztése és alkalmazása egyre inkább a modern gyógyszerészet és anyagtudomány határterületévé válik.

Az én munkám célja az illóolaj-tartalmú gyógyszeres tapaszok kifejlesztése és ezeknek a tulajdonságaik megvizsgálása volt. A kutatás során több különböző illóolajat és szilikon-polimert használtam és vizsgáltam meg különböző módszerek alkalmazásával.

Célkitűzések:

1. Transzdermális terápiás célra megfelelő illóolaj kiválasztása
2. A kiválasztott illóolaj tulajdonságainak vizsgálata, ez alapján egy megfelelő szilikon mátrix-összetétel kiválasztása
3. Transzdermális terápiás célra alkalmas tapasz prototípus létre hozása

Kutatásom során sikerült a megfelelő illóolaj kiválasztása a transzdermális tapaszhoz, mely a fahéjolaj lett és ennek a fő komponensét, azaz a fahéjaldehidet használtam a további vizsgálatok során. Ezután a membrándiffúziós mérésekből azt a következtetést vontam le, hogy a két szilikonpolimer közül (RT601 és R-20) az R-20 volt kompatibilisebb a hatóanyaggal. Végezetül pedig a három tapasz prototípus elkészítése után az abszorberes tapasz görbéje mutatta a legszabályosabb hatóanyag leadást, valamint azt is megfigyeltem, hogy a ragasztó réteg elősegíti a szabályozottabb hatóanyag leadást.

Jövőbeni munkám során szeretném a késztermék pontos összetételét megállapítani és ezt további vizsgálatok alá vetni, ezáltal egy a gyógyászatban is alkalmazható illóolaj-tartalmú fájdalomcsillapító készítményt kifejleszteni.

Alternatív proteomikai mintaelőkészítési módszerek különböző biológiai minták vizsgálatához

Molnár Alexandra, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Turiák Lilla** tudományos főmunkatárs
HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport
Balbisi Mirjam tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport

Belső konzulens: **Dr. Horváth Viola** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia tanszék

A proteomika az a tudományág, mely a biológiai rendszerek fehérjekészletének átfogó vizsgálatával foglalkozik, és célja a fehérjék szerkezetének, funkcióinak és biológiai rendszerek irányításában betöltött szerepének vizsgálata. Egy sikeres proteomikai vizsgálat kivitelezéséhez szükséges a teljes munkafolyamat optimalítása. Ennek elengedhetetlen része a megfelelő mintaelőkészítési módszerek alkalmazása, a korszerű folyadékkromatográfiához kapcsolt tömegspektrometriai mérések elvégzése, valamint a mérések során kapott nyers adatok feldolgozásához szükséges proteomikai szoftverek és adatbázisok használata. TDK munkám során ezek közül a mintaelőkészítés optimalizálásával foglalkoztam.

A proteomikai mintaelőkészítések általános problémái, hogy az elterjedten alkalmazott oldatban történő tripszines emésztés, majd C_{18} oszlopon történő tisztítás összetett többlépcsős folyamat, mely időigényes és jelentős mintavesztéssel járhat. Ígéretes alternatívát nyújtanak az irodalomban található egy edényben történő mintaelőkészítések, melyek közül az SP3 és az SP2 paramágneses gyöngyök használatán, az SP4 oldószeres kicsapáson alapul. Az említett módszerek korlátai, hogy míg az SP3 csak fehérje minták, addig az SP2 kifejezetten csak peptidminták előkészítésére lett fejlesztve, továbbá az SP4 módszer eredményes alkalmazásához jellemzően nagyobb mintamennyiségek szükségesek.

A kutatómunkám célja volt, hogy eltérő biológiai eredetű minták (sejtlizátum, vérplazma, membrán és szövet) proteomikai elemzése során fehérje- és peptidszinten teszteljem az SP2, SP3 és SP4 módszereket, valamint két saját fejlesztésű módszert (SPy és SPx), és összehasonlítsam az általánosan használt mintaelőkészítési eljárással. A mérések kiértékelése során elemeztem az egyes módszerekkel azonosított peptidok és fehérjék számát, vizsgáltam a protokollok szelektivitását a fehérjék/peptidok izoelektromospontja, mérete és hidrofilitása szerint, valamint tanulmányoztam a fehérjék relatív mennyiségeit a referencia eljáráshoz (C_{18}) képest.

Az eredmények alapján azok a következtetések vonhatók le, hogy az eltérő típusú biológiai minták esetében különböző módszerek szolgáltatták a legtöbb azonosított fehérjét és peptidet. Azonban egy protokoll jósága csupán a fehérjeszám alapján nem eldönthető, fontos megvizsgálni többek a kromatogramok tisztaságát, és értékelni a módszerek időhatékonyságát és gazdaságosságát. A dolgozatban tárgyalt eljárások közül a saját fejlesztésű SPy módszer bizonyult optimálisnak a legtöbb biológiai minta proteomikai célú feldolgozására. Mivel a módszer nem csak egyszerűbb és költséghatékonyabb alternatívát kínál a hagyományos, oldatban történő tripszines emésztésen és C_{18} tisztítási protokollon alapuló mintaelőkészítéshez képest, de hozzájárulhat bizonyos biológiai minták proteomjának részletesebb feltérképezéséhez, és a bennük lezajló sejtbiológiai/biokémiai folyamatok mélyebb megértéséhez.

Ioncserés kromatográfias oszlopok minősítése és adalimumab fehérje tisztításának optimalizálása

Márkus Eszter, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Hirsch Edit** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulensek: **Vaskó Dorottya** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Madarász-Kádár Szabina tudományos segédmunkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az antitestek olyan fehérjemolekulák, amelyeket az immunrendszer termel annak érdekében, hogy felismerje és elősegítse az idegen anyagok (antigén) eltávolítását a szervezetből, amely lehet baktérium, vírus vagy toxin. Az első monoklonális antitestet tartalmazó készítmény forgalmazását 1986-ban hagyta jóvá az Amerikai Gyógyszerhatóság (FDA), amelyet számos területen sikerrel alkalmaztak, mint például szív- és érrendszeri, légzőrendszeri, rákos megbetegedésekre, illetve asztma kezelésére is.

A humán szervezetben alkalmazható biogyszereknek kiemelten magas tisztasági követelményeknek kell megfelelniük, az esetleges mellékhatások elkerülése érdekében. A tisztítási folyamat hatékonyságának javítása érdekében új típusú ioncserés kromatográfias oszlopok kerülnek forgalomba, amelyek optimális vizsgálati módszerei még nem kidolgozottak, ezért szükséges ezen oszlopokat alkalmazó analitikai módszer fejlesztése. Ezért munkám célja egy hatékony anioncserés kromatográfias módszer kidolgozása volt az Adalimumab antitestek tisztítására. Először a minta pH-ját, az elúció mennyiségének optimalizálását végeztem el, amelyek alapján meghatároztam a megfelelő módszert a három pH-n is vizsgált sógradiens optimalizálásához. Megvizsgáltam különböző beállítási paraméterekkel végzett tisztítások során gyűjtött minták fehérjetartalmát, méreteloszlását, valamint szennyezők mennyiségének meghatározását. Az eredmények alapján sikerült egy optimális anioncserés kromatográfias módszert kifejlesztenem, amely biztosítja a megfelelő fehérjekoncentrációt, miközben jelentősen csökkenti a szennyezők mennyiségét.

Az általam kifejlesztett módszer lehetőséget biztosít a biogyszerek tisztításának hatékonyabbá tételére, ezáltal növelve a gyártási folyamat megbízhatóságát és biztonságát, hozzájárulva a humán alkalmazásra szánt készítmények minőségének javításához.

Levegődiszperziós modellezés validálása telepített mérőállomásokkal

Kertesi Csongor, Zsigmond Levente (középiskolás)

Témavezető: **Gógh Zsolt** felkészítő tanár
Petrik Lajos Két Tanítási nyelvű Technikum

Az új utak tervezésénél, de a már megépültek környezeti hatásainak vizsgálatában is ma már elterjedt módszerek a térinformatikai szimulációs vizsgálatok a mérnöki eszközök között. Tervezés vagy szakvélemény szinte nem készülhet el ezek nélkül. De kérdés az, hogy ezek a tervezési értékek, bár körültekintően, sok tényező figyelembevételével, matematikai háttérrel készülnek, mégis mennyire megbízhatóak. Egy konkrét területen való modellezéssel, szenzoros kontrollmérésekkel ennek a kérdésnek próbáltunk utána járni.

A szenzoros mérések tekintetében, a mérőállomások kialakításának kérdésében elsődleges szempont, hogy a mérési eredmények mennyire közelítik meg a valós, várható adatokat. Az általunk ismert Sensirion, SEN-55 típusú szenzorok felhasználásával alakítottuk ki saját szállópor-koncentrációt (PM) mérő állomásainkat, ezekhez terveztük meg a környezeti hatásoktól védő mérőházakat. Alapjuk a német mérnöki szabvánnyal rendelkező Sigma-2, passzív pormintavevő (VDI 2119:2013). Az állomások egy Raspberry Pi 4 PC-vel vannak kiegészítve, ezek pedig jelen állapotban lokálisan, egy SD kártyára tárolják a szenzor által mért adatokat. A mérőállomások úgy alakítottuk ki, hogy a folyamatosan gyűjtött adatokat meghatározott időközönként WIFI-hálózaton vagy 4G modemen keresztül online is el tudják küldeni a kialakított adatfeldolgozó szervernek. Lehetőségünk nyílt egy alkalmas kereskedelmi szoftver megismerésére és munkánkban történő felhasználására. Az AERMOD Cloud levegődiszperziós modellező program előrejelzi, hogy a szennyező anyagok hogyan oszlanak el a légkörben a különböző szennyező forrásokból, figyelembe véve az épület hatását, a domborzatot, a meteorológiát, a szélirányban lévő távolságokat és egyéb tényezőket. A szimuláció matematikai egyenletek és algoritmusok segítségével jellemzi a légköri folyamatokat, a szennyezőanyagok talajszinten való eloszlását.

Ezért kiemelt feladatunk volt a kijelölt hatásterületre jellemző konkrét időjárási, domborzati, Lidar-épület adatállomány, forgalmi, és háttérérték adatok beépítése, amely sikeresen megtörtént. Kijelölt konkrét vizsgálati területünk az M3-as autópálya városi bevezető szakasza, az azt övező lakóövezet. Itt négy mérőállomást alakítottunk ki, az útfelület közvetlen szomszédságától a jellemző városi háttérértékek eléréséig. Munkánkkal a szimulációs légszennyezési programok által generált adatok, relatíve kis területű környezetre érvényes használhatóságát vizsgáltuk saját állomásaink méréseivel kontrollálva. Ezzel kísérletet tennénk a vonatkozó törvényi szabályozás felülvizsgálatára.

HKUST-1@grafénszármaszék társított rendszerek morfológiai jellemzése

Altsach Vivien Barbara, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. László Krisztina** Professor Emerita
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Bulátkó Anna** PhD-hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A környezetbarát technológiák fejlesztésére való törekvések felerősítették a hidrogén- és metángáz gazdaságosabb tárolásának igényét. Az adszorpciós elvű gáztárolás a nagynyomásúnál biztonságtechnikailag, a cseppfolyósnál energetikailag kedvezőbb lehetőség. A nanopórusos anyagok kifejezetten alkalmasak lehetnek erre a célra. Gázmegkötő képességük révén ígéretes képviselőjük a fémorganikus térhálók (metal organic frameworks – MOF-ok). A térhálós szerkezet hálópontjaiban többértékű fémionok vagy fémklaszterek helyezkednek el, amelyeket koordinációs kötésekkel kapcsolódó szerves ligandumok tartanak össze. Ennek köszönhetően egy rendezett pórusszerkezetű, háromdimenziós nyitott térhálót hoznak létre. A pórusszerkezet finomhangolására szerves ligandumok és fémionok széles választéka biztosít lehetőséget. [1]

A HKUST-1 (Hong-Kong University of Science and Technology) vagy másnéven a réz-benzol-1,3,5-trikarbonsav, nagy kapacitása miatt metántárolásra az egyik legalkalmasabb jelölt. Alkalmazhatóságának gátat szab nedvességre való érzékenysége és a rossz hővezetése. A nedvesség a szerkezeti stabilitást közvetlenül befolyásolja [2], míg a rossz hővezetés az adszorpciós és deszorpciós ciklus hatékonyságát. Az adszorpció során felszabaduló hő a rendszert felmelegíti, ezzel csökkentve a kapacitást. Ezzel szemben a deszorpció során a rendszer lehűl, a tárolt gáz egy része az adszorbensben marad.

A kompozitrendszerek kialakítása megfelelő hővezetőképességű pórusos anyagokkal megoldást jelenthetnek e kihívásokra. Erre a célra módosított grafénszármaszékot használtam fel. A grafén alapvetően a szén egy atomnyi vastagságú allotróp módosulata, melyben a szénatomok sp^2 hibridállapotúak. Fontos tulajdonságai a kis sűrűsége, a flexibilitása és a kiemelkedő hővezetőképessége, illetve hidrofobitása.

Négyféle grafénszármaszékkel társítottam a HKUST-1-et. A TDK-munkám keretében az előállított kompozitminták morfológiáját vizsgálom. A pásztázó elektronmikroszkópos felvételek elemzéséből láthatjuk a lemezes grafénszármaszékot és a HKUST-1 kristályok eloszlását, illetve, hogy befolyásolják-e a grafénszármaszékot a HKUST-1 kristályok növekedését. A nitrogéngáz adszorpciós vizsgálatokkal a pórusszerkezetéről és a fajlagos felület változásairól kaphatok képet, illetve következtethetünk a minták gázmegkötő képességeire. Az por-röntgendiffrakciós mérésekkel a minták kristályosságát jellemzem.

[1] Fangli Wang, Hailing Guo, Yongming Chai, Yanpeng Li, Chenguang Liu, The controlled regulation of morphology and size of HKUST-1 by “coordination modulation method”, *Microporous and Mesoporous Materials* **173** (2013) 181-188

[2] Domán Andrea, Metal-organic framework-nanostructured carbon composites, PhD-értkezés, BME Oláh György Doktori Iskola, 2020.

Szén-dioxid hidrogénezés gallium-nikkel klasztereken

Antal Balázs, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Hóltzl Tibor** tudományos főmunkatárs
HUN-REN–BME Számítógépvezérelt Kémia Kutatócsoport

A szén-dioxid az ipari forradalom óta hatalmas mennyiségben kerül a légkörbe, az emiatt kialakuló globális felmelegedés hatásait pedig a mindennapjainkban is egyre inkább tapasztaljuk. Annak felfedezése, hogy átmenetifém katalizátorokkal lehetséges a szén-dioxidot számunkra hasznos termékekké alakítani, új lehetőséget nyitott a probléma orvoslására. Erre a célra ígéretes katalizátornak tűnnek a gallium-nikkel ötvözetek, viszont a megfelelő katalizátorok létrehozásához szükséges az aktivitásuk és szelektivitásuk optimalizálása.

Az idei munkám középpontjában a gallium-nikkel klaszterek reaktivitása és katalitikus hatása volt. A kutatómunkámat számítós kémiai módszerekkel végeztem. Elsőként megvizsgáltam a kisebb klaszterek reaktivitását szén-monoxiddal. Azt találtam, hogy a klaszter elektronszerkezete jelentős mértékben képes befolyásolni az adszorpciós energiát. Mivel a szakirodalom alapján a szén-monoxid katalizátorméregként hathat a nikkelle, így feltételeztem, hogy csak a szén-monoxidot kevésbé erősen kötő klaszterek lehetnek alkalmasak katalizátornak. Az ez alapján ígéretesnek bizonyult klaszterek esetén megvizsgáltam a szén-dioxiddal szembeni reaktivitást. Feltérképeztem annak adszorpciós mechanizmusát, és azt találtam, hogy az összetétel függvényében többféle módon is képesek a klaszterek aktiválni a szén-dioxidot. Első lépésben a nikkeltöbbletű klaszterek vizsgálatát kezdtem el, főként a Ga_2Ni_3 és a Ga_2Ni_4 klaszterekét. Azt találtam, hogy ezeknél a szén-dioxid hidrogénezésére tipikusan alkalmazott körülmények esetén a szén-dioxid redukciója várhatóan nem a tiszta fémklasztereken, hanem a klaszter-hidrideken megy végbe, valamint a hidridképződés jelentősen befolyásolhatja a reaktivitást. Végül elkezdtem a lejátszódó szén-dioxid redukció lehetséges útvonalát feltérképezni. A számításaim rámutattak arra, hogy a gallium-nikkel klaszterek tervezésével és módosításával azok reaktivitása nagyban befolyásolható. Reményeim szerint mindezeket felhasználva a jövőben lehetőség nyílik a jelenleginél hatékonyabb és szelektívebb szén-dioxid redukció megvalósítására.

Ezüsttel adalékolt TiO₂ szol-gél bevonatok fényátersztése és fotokatalitikus hatása

Bors Adrienn Márta, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Albert Emőke** egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

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

Munkám célja olyan szol-gél eljárással előállított mezopórusos titán-dioxid bevonatok fotokatalitikus hatásának növelése volt, amelyek növelik transzparens hordozójuk fényátersztését. A bevonatokat mártásos technikával állítottam elő üveghordozón, amelyre először kompakt szilícium-dioxid védőréteget választottam le az üvegben levő nátrium-ionok fotooxidációt gátló hatásának elkerülése miatt. A védőrétegeket pórusképző anyagot tartalmazó titán-dioxid nanorészecskékkel vontam be, a fényátersztés növelése céljából a bevonatokat vizes ammóniaoldat gőztérében öregítettem. A bevonatokat rétegenként magas hőmérsékleten kondicionáltam. A mintákat UV-látható spektroszkópiával jellemeztem a 400-800 nm-es tartományban felvett transzmittancia spektrumaik alapján. A spektrumokat vékonyrétegoptikai modellek felhasználásával, illesztéses módszerrel elemeztem és meghatároztam a bevonatok vastagságát és törésmutatóját. A fotokatalitikus tulajdonság növeléséhez a bevonatok nyitott pórusrendszerébe ezüst-ionokat juttattam, amelyeket a kondicionáláshoz hasonlóan magas hőmérsékleten (és időn keresztül) kezeltem azért, hogy az ezüst-ionok fémmé redukálódjanak. A fotokatalitikus hatásra a bevonatok pórusrendszerébe impregnált rodamin 6G színezékmolekulák UV-, illetve látható fény hatására bekövetkező, szilárd-levegő határfelületen végbemenő fotooxidációjának mértékéből következtettem.

Az eredményeket elemezve megállapítottam, hogy az ammóniás gőztérben öregített minták UV- és látható tartományban is mutatnak fotokatalitikus aktivitást. Az ezüstrészecskék UV-tartományban nem befolyásolták számottevően a fotokatalitikus hatást, látható tartományban pedig a rodamin 6G színezékérzékenyítő tulajdonsága leárnyékolta az adalékolás hatását. A színezékmolekulák besugárzása során az ezüstartalmú minták esetében annak nagyobb mértékű dimerképződését figyeltem meg (az ezüstöt nem tartalmazó mintákhoz képest). Az ezüstartalom növelésével a bevonatok fényátersztést növelő hatása kisebbnek mutatkozott, illetve fotokatalitikus hatása is kisebbnek bizonyult.

Különböző összetételű poliszacharid/nanocellulóz gélek előállítás és jellemzése

Huszka Szabolcs, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Fekete Erika** tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi tanszék

Konzulensek: **Dr. Csiszár Emília** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi tanszék
Dr. Móczó János tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi tanszék

A fosszilis energiahordozók csökkenő mennyisége és a környezetvédelmi törekvések miatt a 21. században előtérbe kerültek a különböző természetes/megújuló alapanyagokból készült műanyagok, azaz a biopolimerek. Ezen vegyületek vagy megtalálhatóak a természetben, vagy természetben fellelhető molekulából szintetizálhatóak, így kevésbé terhelik a környezetet, mint a kőolaj alapú műanyagok. Ezenfelül számos speciális felhasználási területen (például az orvostudományban) kifejezetten előnyös vagy társadalmilag elvárt a természetes molekulák alkalmazására való törekvés. Jelen pillanatban számos biopolimer alkalmazási lehetőségeinek feltérképezésére irányulnak kutatások.

A kitozán az állati vagy növényi eredetű kitinből szintetizálható dezacetilezés útján, míg az alginát a barnamoszatok sejtfalából nyerhető ki. A cellulóz az egyik legnagyobb mennyiségben hozzáférhető makromolekula, a bakteriális cellulózt különböző mikroorganizmusok állítják elő különleges szerkezetet adva a polimernek, míg a nanokristályos változat szálainak vastagsága 5–20 nm körüli, ami speciális tulajdonságokat eredményez.

Az alapanyagokból megfelelő homogenizálást követően géleket készítettem, majd tanulmányoztam az előállított krio- és hidrogélek tulajdonságait. A hidrogélek heterogén rendszerek, nagy mértékben tartalmaznak a polimer térhálós rendszerén felül egy duzzasztó közeget, amely jelen esetben víz volt. A polimereket utólagosan térhálósítottam és duzzasztottam a kívánt forma elnyerése érdekében, a cellulózt a térhálósítás előtt keverttem erősítőanyagként a rendszerhez.

A poliszacharid géleket különböző összetételben vizsgáltam, hogy megtaláljam az alapanyagokból társítható legjobb tulajdonságú rendszereket. A kapott gélek szerkezetét pásztázó elektron mikroszkóppal tanulmányoztam. A térhálósítást követően kiszámítottam a gélek duzzadását, valamint a színezékfelvételét, amiből az esetleges víztisztítási célokra való felhasználásra következtethetünk. Mechanikai vizsgálatok segítségével jellemeztem a térhálósítás előtti és utáni rendszerek merevségét, amely fontos lehet a különböző orvosi felhasználások során.

Önlebomló poli(ϵ -kaprolakton) kompozitok

Magyari Benedek, V. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Hegyesi Nóra** tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
HUN-REN TTK AKI Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport

A poli(ϵ -kaprolakton) (PCL) egy biodegradálható poliészter, egyben új alternatíva az orvosi, ipari és környezetvédelmi alkalmazásokban, különösen orvosi eszközök, mesterséges szövetek és csomagolóanyagok terén [1]. A PCL hidrolízise enzimatis úton katalizálható, ezáltal lebomlása gyorsítható és szabályozottá tehető [2]. Kutatócsoportunkban korábban olyan kompozitokat állítottak elő, ahol a PCL-t bontó enzimet egy hordozó segítségével keverték a polimerbe, miközben az enzim megőrizte aktivitását és a kompozit pufferben degradálódott [3]. Ugyanakkor a maximálisan elért tömegvesztés 30-40% volt. Kutatómunkám célja annak felderítése volt, hogy miért áll le a degradáció. Kutatásaim során Laponite® rétegszilikát felületén kémiai úton immobilizált lipázt (*Burkholderia cepacia* lipáz) kevertem poli(ϵ -kaprolakton)-ba, majd különböző hőmérsékleteken vizsgáltam a degradációs kinetikát (tömegmérés, UV-Vis) és a visszamaradó minta kristályosságát (DSC).

Eredményeink alapján a kristályos PCL degradációjának mértéke a degradációs hőmérséklettől nagyban függött: szobahőmérsékleten elhanyagolható volt, míg az olvadási csúcshoz közel, 50 °C-on a minták teljes mértékben feloldódtak. Méréseink rámutattak, hogy összefüggés található a szerkezet és a lebomlás mértéke között, a degradációt meghatározza a polimer kristályossága, ugyanis a kristályos fázis degradációja elhanyagolható sebességű az amorf részekhez képest. Ezek az eredmények fontosak az önlebontó polimer rendszerek kutatása szempontjából, de gyakorlati jelentőséggel is bírnak, hiszen elképzelhető olyan műanyagok gyártása, melyek az alkalmazási hőmérsékleten stabilak, de melegvízbe, vagy akár mosógépbe téve kismolekulás anyagokra bomlanak.

1. Malikmammadov, E., et al., PCL and PCL-based materials in biomedical applications. *Journal of Biomaterials Science, Polymer Edition*, **2018**, 29(7-9): p. 863-893.
2. Gan, Z., et al., Enzymatic degradation of poly(ϵ -caprolactone) film in phosphate buffer solution containing lipases. *Polymer Degradation and Stability*, **1997**, 56(2): 209-213.
3. Hegyesi, N., et al., Controlled degradation of poly(ϵ -caprolactone) for resorbable scaffolds. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, **2020**, 186, 10678.

Diamino-oxidáz nanoszálás formulációja innovatív terápiák kifejlesztéséhez

Stummer Tamás, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Balogh-Weiser Diána** egyetemi adjunktus
BME VBK Szerves Kémia és Technológia tanszék

Konzulens: **Tóth Gergő Dániel** PhD-hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Dr. Ender Ferenc egyetemi docens
BME VIK Elektronikus Eszközök Tanszéke

Ma már számos olyan megbetegedést azonosítottak, melynek hátterében valamely, a szervezet működéséhez nélkülözhetetlen enzim hibás, nem elégséges működése áll. Ezen betegségek kezelését célozzák az enzimhelyettesítő terápiák (ERT), melyek alapja, hogy az alacsony vagy hiányzó enzimaktivitást exogén forrásból pótolják.

A szervezetben felhalmozódott hisztamin lebontásáért a diamin-oxidáz (DAO) enzim felelős. Amennyiben a szervezet képtelen megfelelő mennyiségű DAO előállítására, hisztamin intoleranciáról beszélhetünk, mely allergiaszerű, olykor krónikus idegrendszeri és gasztroenterális tüneteivel rontja az érintettek életminőségét. Ennek kezelésére már jelenleg is kaphatók piaci forgalomban étrendkiegészítők, mint a DAOfood Plus[®] kapszula, valamint a Daosin[®] étrendkiegészítő tableta, azonban ezen termékek választéka igencsak szűkös.

A modern nanoformulációs technikák számos enzimet tartalmazó terápiás formula esetében igazoltan növelték azok stabilitását és aktivitását, így ígéretes alternatívát nyújthatnak korszerű DAO-terápiás készítmények előállítására is. Az elektrosztatikus szálképzés napjainkban egyre inkább teret hódító nanoformulációs technológia, melynek segítségével gyorsan és költséghatékonyan állíthatunk elő szilárd, nagy fajlagos felületű nanoszálás struktúrákat. Az így előállított szövedékek képesek mind a felületükön megkötve, mind pedig a szálak belsejébe csapdázva enzimeket rögzíteni és formulálni.

A kutatómunkánk célja egy új, nanoformulált DAO-tartalmú enzimmészítmény kifejlesztése. A DAO-enzimet elektrosztatikus szálképzéssel előállított poli(vinil-alkohol) (PVA) nanoszálakba csapdázzuk. Munkánk során optimalizáljuk a szálképzés paramétereit, és tanulmányozzuk a nanoszálak belsejébe ágyazott enzimek hatását a szálképzési folyamatban nyert készítmények szerkezetére. Vizsgáljuk továbbá a szálképzéshez használt prekursor oldatok viszkozitását rotációs viszkoziméter segítségével. A szálképzés során képződött rendezetlen szövedék morfológiáját fénymikroszkóppal, illetve pásztázó elektronmikroszkóppal elemezzük. A natív és a rögzített DAO aktivitását UV-Vis-spektrofotometriás módszerrel vizsgáljuk, összehasonlítva a kereskedelmi forgalomban hozzáférhető DAO-tartalmú készítményekkel.

Mukoadhézió jellemzése hidrogél felszínen húzó és nyíró igénybevétel alkalmazásával

Szayly Kata, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Gyarmati Benjámín Sándor** egyetemi docens
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Stankovits József Gergely** egyetemi tanársegéd
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Mukoadhézív, azaz nyálkahártyára tapadó tablettákkal és tapaszokkal a hagyományos gyógyszerformákhoz képest a hatóanyag nagyobb biohasznosulása érhető el, emellett betegbarát módon megvalósítható helyi és szisztémás gyógyszeradagolás is. A mukoadhézió folyamata azonban összetett, és megértése, így szabályozási lehetőségei is hiányosak.

Az ex-vivo mukoadhéziós tesztek állati nyálkahártyákon végzik, melyek kiértékelése nehézkes a minták természetes diverzitása miatt. Ezen természetes nyálkahártyák viszkoelasztikus és tapadási tulajdonságai azonban magas víztartalmú, reprodukálható szerkezetű hidrogélekkel a szakirodalmi előzmények alapján jól modellezhetők lehetnek, így az ezen hidrogéleken végzett mérések jelentősen hozzájárulhatnak a mukoadhézió részfolyamatainak megértéséhez. Ezen a területen jelenleg elsősorban nagy áteresztőképességű, húzási igénybevételre épülő tapadási tesztek alkalmaznak, melyek fiziológias relevanciája korlátozott. Az eddig kevésbé alkalmazott nyírási tesztek jobb modelljei lehetnek a szervezetben lejátszódó terheléseknek, és a rotációs, illetve oszcillációs nyírási mérések fontos kiegészítői lehetnek a hagyományos tapadási mérések eredményeinek.

A Lány Anyagok Kutatócsoport mesterséges poli(vinil-alkohol) (PVA) és mucin-PVA nyálkahártya-analóg hidrogéleket fejlesztett ki a mukoadhézió reprodukálható modellezésére. Saját kutatómunkám lényegi része ezen hidrogélek viszkoelasztikus tulajdonságainak jellemzése, a gélek felületén szilárd polimer tabletták tapadásának jellemzése, valamint a tapadást befolyásoló tényezők felderítése volt, többféle típusú mechanikai igénybevétel alkalmazásával. A készített nyálkahártya-analógokon tablettázási segédanyagként elterjedten alkalmazott polimerekből (poliakrilsav, hidroxipropil-metilcellulóz, kitozán) előállított tablettákkal jellemeztem az adhéziót; húzásra épülő tapadási tesztek, valamint új, általam fejlesztett nyírási módszereket (rotációs és oszcillációs) is alkalmaztam. A különböző mérési módszerekkel mért eredményeket összehasonlítva komplex következtetéseket tudtam levonni a mukoadhézió összetett folyamatával kapcsolatban.

A **EKÖP-24-2-BME-120** számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a 2024-2.1.1-Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Program pályázati program finanszírozásában valósult meg.

Virtuális vegyületek a szerves félvezetők fejlesztői számára

Huo Yufei (középiskolás)

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

Napjainkban a gyógyszerkutatáson túl más területeken is megjelentek a szerves molekulák, mint nagy potenciállal rendelkező vegyületek. A napelemek, LED-ek és más félvezetők fejlesztői számára komoly korlátot jelent a szilícium, mint domináns alapanyag, hiszen tulajdonságai csak egy adott határon belül változtathatók. Ugyanakkor mivel a szerves anyagok bizonyos típusainál is megfigyeltek már félvezető tulajdonságokat, az utóbbi évtizedekben egyre nagyobb figyelmet kaptak ezek a vegyülettípusok. Hasonlóan a gyógyszerkutatás korai fázisához, a számítógépes technológiák a félvezetők fejlesztése során is remekül alkalmazhatók bizonyos tulajdonságok előzetes becsléséhez, amelyekre építve elvégezhető nagyszámú anyag virtuális szűrése. Ennek köszönhetően vegyületek milliónyi hasonlíthatók össze, még mielőtt laboratóriumi mérésre lenne szükség. A polcra elérhető szerves vegyületek száma ugyanakkor nagyjából tízmillióra tehető, viszont a kutatóknak folyamatosan új ötletekre, szabadalom által nem védett szerkezetekre van szüksége, hogy könnyebben azonosíthatóak a potenciálisan hasznosítható molekulákat. Habár elméletileg bármilyen vegyület előállítható, a korai fázisban ha egy molekula jó tulajdonságokkal rendelkezik, azt következő lépésben laboratóriumban is vizsgálni fogják, így elérhetőségben (idő és ár) a polcra rendelhető molekulákhoz hasonlóan kell lennie egy anyagnak. Erre a problémára a virtuális vegyületek nyújthatnak megoldást, amelyek egy-két elterjedten alkalmazott szintetikus reakcióra, valamint elérhető építőkövekre épülnek. Ilyen típusú terek mára többmilliárdos méretben érhető el a gyógyszerkutatók számára, viszont a félvezetők fejlesztői csak ezekre tudnak támaszkodni, mivel dedikált terek még nem készültek számukra. Jelen kutatás célja azonosítani azokat a főbb reakciótípusokat, amelyek alkalmasak lehetnek virtuális tér fejlesztésére ezen iparág számára. Ilyen szempontból kiemelten fontos figyelembe venni olyan tulajdonságokat, mint az új vegyületek konjugált alszerkezetei, ugyanis ezek kibővítésével tudjuk növelni a hasznosíthatóság esélyét. A reakciók kiválasztásánál fontos szempont, hogy várhatóan könnyen és hatékonyan kivitelezhető legyenek (elérhető és olcsóbb segédanyagok, enyhébb körülmények), könnyen elérhető funkciócsoportokra épüljenek, valamint az építőkövek összekapcsolásával megtartsuk és lehetőleg kibővítsük a konjugációt a szerkezetben. Ha két egymást követő szintetikus lépést feltételezünk, akkor már néhány száz vegyület esetében is milliós nagyságrendű tér építhető fel, ugyanakkor ennek az értéke akkor emelhető, ha a több funkciót tartalmazó vegyület csoportjait is összeköti a konjugáció, lehetővé téve a kiterjesztést. A fentiek azonosításához kézenfekvő megoldásnak tűnik SMARTS alapú szűréseket végezni, mivel ezek alkalmasak lehetnek a különböző alszerkezeti minták azonosítására (reakciócentrum, azt befolyásoló mintázatok, konjugáció, stb.).

Csontpótlásra szánt politejsav kompozitok felületkezelése enzimes degradáció segítségével

Ur Attila, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Renkeczné Dr. Tátraaljai Dóra** tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A polimerkompozitokból készült vázanyagok célja, hogy kipótolják a roncsolódott csontszövetet és segítsék a sérült csontokat a felépülésükben. Korábbi kutatások alapján a politejsav (PLA) és nano-hidroxiapatit (HAp) kompozitok ígéretesnek bizonyultak olyan alapanyag kifejlesztésében, melyből nyomtatószálat előállítva, 3D nyomtató segítségével könnyen személyre szabható méretű és alakú darab készíthető^[1]. A kutatócsoportunk korábbi kísérletei alapján a nano HAp szemcsék aggregálódása sztearinsavas (StAc) felületkezeléssel nagy mértékben csökkenthető^[2].

A préselt filmek felületén az előállítási technika sajátossága miatt a töltőanyag előfordulási valószínűsége csekély, így a töltőanyag hatásának vizsgálata nem lehetséges. Enzimes degradációval a filmfelületről a politejsav réteg eltávolítható, ezáltal a nano-hidroxiapatit szemcsék felszínre kerülnek, a felület fizikai-kémiai tulajdonságai megváltoznak a sejtek kötődése a felületen javulhat. A kutatómunkám célja, a korábban előállított kompozitok felületi módosítása proteináz K enzim alkalmazásával és a módosított felület tulajdonságainak meghatározása. Kutatásom során a HAp-ra nézve különböző arányban alkalmazott (0, 2, 4, 6, 8, 10 m/m%) sztearinsavval felületkezelt mintákból készítettem préseléssel filmeket, a HAp tartalom mindig 5 m/m% volt. Ezeket 24 órán át enzimes degradációnak vettem alá, majd összehasonlítottam az enzimes kezelés előtti és utáni jellemzőket. Tömegméréssel, pH méréssel és spektroszkópiás tejsavkoncentráció méréssel meghatároztam az eltávolított politejsav mennyiségét, vizsgáltam a filmek felületét atomierő mikroszkópiával (AFM), infravörös spektroszkópiával (FT-IR ATR) és peremszög méréssel, valamint kolorimetriás módszerrel, tetrazólium só (XTT) segítségével mértem, hogy a maratott minta felületére helyezett sejtek száma inkubált közegben 1 hét alatt hogyan változik.

Eredményeim alapján a felületi tejsavréteg eltávolítása sikeres volt, a HAp szemcsék elérhetősége a sejtek számára javult.

Hivatkozások

[1] Shuai, C.; Yu, L.; Feng, P.; Gao, C.; Peng, S. *Colloids Surf. B, Biointerfaces* 2020, 193, 111083.

[2] Székelyi Soma Alex, *Sztearinsavval felületkezelt hidroxiapatit alkalmazása politejsav alapú kompozitokban*, Szakdolgozat, BME, Budapest, 2023.

Felkonvertáló nanorészecskék kompozit vékonyrétegei: emissziós intenzitás és energiaátadási folyamatok jellemzése

Borbás Balázs, I. évf. (MSc)

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

Konzulens: **Dr. Tegze Borbála** egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A felkonvertáló nanorészecskék (*upconverting nanoparticle*, UCNP) képesek nagyobb hullámhosszú fotonokkal való gerjesztés hatására kisebb hullámhosszú – azaz nagyobb energiájú – fotonok emissziójára. Az UCNP-szuszpenziók vizsgálata széles körű a tudományos szakirodalomban, azonban kevés publikáció foglalkozik az UCNP-tartalmú kompozit bevonatok jellemzésével annak ellenére, hogy ezek a bevonatok hozzájárulhatnak számos gyakorlati alkalmazás (pl. optikai szenzorok, fotovoltaiikus eszközök) megvalósításához.

Kutatómunkám célja közeli infravörös fényvel gerjeszthető, NaYF₄: 20% Yb³⁺, 0,5% Tm³⁺ felkonvertáló nanorészecskék, illetve a távlati felhasználás szempontjából fontos, a részecskéket tartalmazó kompozit bevonatok előállítására. Fő célkitűzésem olyan funkcionális vékonyrétegek fejlesztése, amelyekben a felkonvertáló nanorészecskékre jellemző anti-Stokes emissziók intenzitása a suszpenziókban mérhető intenzitással összemérhető nagyságú. Vizsgálom kompakt, pórusos és hibrid szilícium-dioxidot, valamint kitozán biopolimert a kompozit bevonatok mátrixanyagoként. A beágyazó közeg anyagi minőségét, szerkezetét és összetételét, a bevonatképzés módját és paramétereit a felkonvertáló emissziós intenzitás maximalizálása érdekében befolyásolom. Eredményeim alapján a legelőnyösebb emissziós és mechanikai tulajdonságokat a kitozánnal alkotott kompozit bevonatok mutatják.

Az alkalmazhatóság fontos paramétere a fotonemisszió intenzitásának hőmérsékletfüggése, illetve más komponensekkel való hatékony energiaátadás. Ebből a célból vizsgálom a felkonvertáló nanorészecskék fluoreszcens színezékmolekulákkal való energiaátadását különböző kolloid rendszerekben. A kialakított kompozit bevonatokban előforduló sugárzási kölcsönhatások eredményei hasznosíthatóak többek között a fotodinamikus rákterápia vagy a fotovoltaiikus eszközök hatásfoknövelése területén.

Kulcsszavak: felkonvertálás, felkonvertáló nanorészecske, kompozit bevonat, kitozán, energiaátadás

A teljes bifunkciós NDST3 heparán-szulfát bioszintézis enzim rekombináns előállítása

Cs. Nagy-Lászlóffy Júlia, II. évf. (MSc)

Témavezető: Dr. Nagy Gergely Nándor egyetemi tanársegéd
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A heparán-szulfát (HS) glükózaminoglikánok az extracelluláris mátrix meghatározó poliszacharid összetevői, biológiai szerepük sokszínűségét meghatározza összetett szulfát módosítási mintázatuk. A HS láncokon az első módosításokat a heparán szulfát *N*-deacetiláz/*N*-szulfotranszferáz bifunkciós enzimek (NDST1–4) végzik, melyek megalapozzák a HS további szulfát módosításait. Az NDST1–4-izoenzimek eltérő hatékonysággal végzik az acetát hidrolízist és a szulfát transzferát a HS-polimeren. Amíg az NDST1- és NDST2-izoenzimek hasonlóan magas bifunkciós aktivitással rendelkeznek, az NDST3-enzim esetén csupán a deacetilezés lépése hatékony. Az NDST3 egy neuronális szövetspecifikus izoenzim, melynek alulműködése összefüggésbe hozható lizoszómális rendellenességekkel és neurodegeneratív betegség kialakulásával. Kutatómunkám célja az NDST3 teljes hosszú nem membrán kötött formájának előállítása volt, mely lehetővé teszi a bifunkciós enzim aktivitásának és HS/heparin bioszintézisben betöltött szerepének vizsgálatát. Az NDST3 előállításához két különböző fehérjekonstrukciót terveztem. A bifunkciós enzim eltérő *N*-terminális kezdetű formáihoz Trigger Faktor chaperonint fuzionáltam molekuláris klónozás révén, majd sikeresen termeltem az így előállított, 140 kDa méretnél nagyobb fehérjéket *E. coli* expressziós rendszerben. A bifunkciós NDST3 szubsztrát kötését heparin kölcsönhatás vizsgálattal tanulmányoztam, mivel korábbi irodalmi adatok alapján a heparin a heparán szulfát/heparin bioszintézis termékeként az ezen útvonal első poszt-polimerizációs lépését katalizáló NDST1- és 2-izoenzimhez specifikusan kötődik. Heparin-affinitás kromatográfia vizsgálataim a bifunkciós NDST3 nagy affinitású heparin kölcsönhatását jelezték, ami igazolta a termelt fehérje glükózaminoglikán kötő képességét. A további biokémiai vizsgálatokat azonban korlátozta az előállított fehérjék limitált hőstabilitása, így megvizsgáltam az NDST3 előállításának lehetőségét emlős expressziós rendszerben adherens HEK293T sejtvonal használatával. A fehérje szekréción alapuló rekombináns fehérjetermeléshez az NDST3 számos bifunkciós és szulfotranszferáz domén fehérje konstrukciójának expressziós plazmidját állítottam elő molekuláris klónozás révén. Előzetes fehérjetermelési kísérletek alapján igazoltam különböző NDST3 szulfotranszferáz domént tartalmazó konstrukciók termelődését HEK-sejtekben, azonban a fehérje szekréción további optimalizációt igényel. Összességében munkám során fontos részeredményeket értem el az NDST3 előállítása és előzetes vizsgálata terén, melyek támpontot jelentenek a bifunkciós NDST3 stabil formájának későbbi előállításához és enzimátikus specifitásának értelmezéséhez.

Gluténfehérjék és fermentált oligo-, di-, monoszacharidok és poliolo vizsgálata kovászás során

Donáth András (középiskolás)

Témavezető: **Muskovics Gabriella** PhD-hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az elmúlt 10–15 évben a glutén és gluténmentes keresőszavak gyakorisága rendkívül megnőtt, köszönhetően annak a népszerűségnek, amelyet a téma az elmúlt évtizedben szerzett. A cöliákia az egyik leggyakoribb autoimmun betegség a világon. Körülbelül minden 100. ember szenved tőle világszerte, mégis sokan nagyon keveset tudnak róla. Ezt a betegséget a glutén által kiváltott túlzott reakció okozza a beteg bélrendszerében. A mikrobolyhok károsodnak, és a táplálék felszívódása nem lesz megfelelő. Az egyetlen megoldás a beteg számára az élethosszig tartó szigorú gluténmentes diéta.

A gluténmentes sütési módszerek palettájának szélesítése érdekében megkezdődtek a kísérletek a kovászással és annak a süteményekben és pékárukban lévő gluténfehérjékre gyakorolt hatásával kapcsolatban. Még nem ismert, hogy ez a folyamat hogyan változtatja meg a rozstermékek fehérjeösszetételét. Ez az, amivel szerettünk volna foglalkozni. Különböző típusú kovászstartereket teszteltünk egységes közegben. A mintákat gluténtartalmát R5 ELISA módszerrel mértük, valamint SE-HPLC és RP-HPLC technikákat alkalmaztunk a fehérjeösszetétel változásainak vizsgálatára. Eredményeink azt mutatták, hogy a nagyobb peptidláncok kisebb láncokra bomlottak, de a toxikus gluténepitópok száma nem változott. Ez a jelenséggel magyarázható, hogy bár a kisebb láncok széttörtek, még mindig tartalmazták ezeket az epitópokat, sőt, a nagyobb láncok is kisebb láncokra törtek, és több új toxikus epitópszakasz jelent meg. Ezt az ELISA-méréseink is igazolták, amelyek a minták emelkedett gluténtartalmát mutatták ki.

A kutatásnak ez a része segíthet megérteni a kovászos erjesztés során zajló folyamatokat a rozsból készült termékekben, és remélhetőleg a jövőbeni, a témával kapcsolatos kutatásokat is elősegíti majd. A kutatás másik része egy másik jelentős krónikus betegséggel, az irritábilis bél szindrómával foglalkozott. Ez a betegség a lakosság közel egynegyedét érinti, mégsem kap elég figyelmet. Az IBS kórtana jelenleg ismeretlen, de számos tanulmány szerint az alacsony FODMAP (fermentált oligo-, di- és monoszacharidok és poliolo) tartalmú étrend bevezetése segíti a betegség kezelését, és enyhíti a tüneteket. Célunk az volt, hogy megértsük a szénhidrát-tartalom változását a kovászás során, és megvizsgáljuk, hogy csökkenthetjük-e a FODMAP-ok mennyiségét ezzel az erjesztési móddal. Itt is egységes közeget használtunk, és ugyanazokat a kovászstartereket alkalmaztuk. Megmértük a mintáink pH-ját az erjesztés előtt és után. HPLC méréseket is végeztünk a mintáinkban, és vizsgáltuk a szénhidrát-tartalom változását. A kísérletek még folyamatban vannak, ezért még nem tudunk végleges következtetéseket levonni.

A dUTPáz-fehérje-kölcsönható partnereinek azonosítása és szerepének vizsgálata egér embrió modellben

Kozma Bianka, IV. évf. (MSc)

Témavezető: Prof. Dr. Vértessy G. Beáta egyetemi tanár
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulensek: Nagy Nikolett tudományos segédmunkatárs
HUN-REN TTK
Tóth Otília PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A DNS stabilitása kritikus fontosságú a genomi integritás megőrzése és a sejtek normális működésének szempontjából. Ennek érdekében a sejtekben számos mechanizmus működik, melyek közül a dUTPáz-enzim fontos szerepet játszik a preventív hibajavításban. Az enzim a dUTP hidrolízisét katalizálja, ezáltal megelőzi az uracil timin helyetti hibás beépülését a DNS-be, valamint biztosítja a sejtek számára a dTTP nukleotid *de novo* bioszintéziséhez szükséges dUMP-prekurzort.

Csoportunk azonban korábban rámutatott, hogy a régóta ismert funkcióján túl az enzim a sejtosztódás és az embrionális fejlődés kritikus folyamataiban is részt vehet. Kutatásaim célja ezen folyamatok részletes tanulmányozása volt az egér korai embrionális fejlődés során. Ehhez immunfluoreszcens festés segítségével vizsgáltam a dUTPáz-enzim lokalizációját 3,5, 4,5 és 6,5 napos blasztociszta állapotú egér embriókban. Eredményeim alapján a dUTPáz citoplazmás és sejtmagi eloszlása az embriók fejlődési korától függően változott, amelynek magyarázata lehet a különböző embrionális sejt típusok eltérő mitotikus aktivitása.

Ezenkívül a dUTPáz-enzim és az tubulin között egyértelmű kolokalizációt mutattam ki egyrészt a korai stádiumú blasztociszták osztódó sejtjeiben a mitotikus és a centrális orsón, másrészt a késői stádiumú embriók trofektodermájában a mikrotubuláris hálózaton. Eredményeim alapján valószínűsíthető, hogy a dUTPáz kölcsönhat a folyamatosan alakuló mikrotubuláris hálózattal, amely további kísérletek elvégzését indokolta. Ennek érdekében ko-immunprecipitációval kapcsolt LC-MS/MS-eljárás segítségével azonosítottam a humán dUTPáz-enzim potenciális kölcsönható partnerei közül az α - és β -tubulint, valamint a TriC-komplex több alegységét is.

Eredményeim arra utalnak, hogy a dUTPáz-enzim túlmutat az eddig ismert preventív szerepén, és kölcsönhatásba lép a mikrotubulusokkal a sejtosztódás és a sejt differenciálódás azon szakaszaiban, ahol a sejtek aktív citoskeletális átrendeződést végeznek. A dUTPáz-enzim élő szervezetekben betöltött szerepének pontos megismerése és ennek megfelelő sikeres gátlása ígéretes terápiás célpont lehet daganatos megbetegedések kezelésében.

3-Kimotripszin-típusú SARS-CoV-2-proteáz biomolekuláris inhibíciója

Kerényi Kornél, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Prof. Dr. Nagy Péter** tudományos igazgató

Országos Onkológiai Intézet Molekuláris Immunológiai és Toxikológiai
Osztály

Dr. Lopata Anna vegyész

Országos Onkológiai Intézet Molekuláris Immunológiai és Toxikológiai
Osztály

A 3-kimotripszin-típusú proteáz (3Clpro) a SARS-CoV-2-vírus egyik kulcsfehérjéje. Proteolitikus aktivitásának köszönhetően keletkeznek a vírusreplikációhoz szükséges funkcionális fehérjefragmensek a vírus-RNS alapján a gazdasejt által legyártott poliproteinekből. A 3Clpro-gátlók fejlesztése ezért a vírusfertőzés enyhítésére irányuló gyógyszerfejlesztések középpontjában áll. Továbbá, az endogéntermelt molekulák 3Clpro aktivitására kifejtett hatásainak mélyebb megértése rávilágíthat arra, hogy egyéntől függően miért nagyon különböző a SARS-CoV-2-indukálta megbetegedések mértéke. A munkám során egy fehérvérsejtek által is szekretált, antimikrobiális hatású biomolekula, a hipotiocianit (HOSCN) 3Clpro enzimaktivására kifejtett hatásait vizsgáltam. Egy irodalomból ismert fluoreszcens detektáláson alapuló eljárás segítségével elvégzett kísérleteim alapján megállapítható, hogy a HOSCN nagyon effektíven gátolja a 3Clpro-proteáz aktivitását. Munkám jelenlegi célja az inhibíció mechanizmusának mélyebb megértése.

**Különböző donorokból származó mesenchymális őssejtek
immunszuppresszív képességét összehasonlítható módon mérő tesztrendszer
beállítása**

Kocsis Boglárka, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kajdácsi Erika** biológus
SE Hematológiai Klinika, Kutatólabor

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

A Semmelweis Egyetem Belgyógyászati és Hematológiai Klinika Kutatólaborjában a Sejtbiológiai és Sejtterápiás Munkacsoport munkájába bekapcsolódva a köldökzsinórból izolált mesenchymális őssejtek (MSC) immunszuppresszív képességét vizsgáló módszer fejlesztésével kezdtem el foglalkozni. Jelen dolgozatom egy olyan tesztrendszer kialakítását részletezi, amiben a különböző donorokból izolált MSC-k T-sejtekre gyakorolt hatását szeretnénk összehasonlítható módon mérni és a későbbiekben adott szempontok alapján osztályozni/rangsorolni.

Az NDST3 *N*-szulfotranszferáz doménjének rekombináns előállítása és biokémiai vizsgálata

Iván Réka Boglárka, IV. évf. (BSc.)

Témavezető: **Dr. Nagy Gergely Nándor** egyetemi tanársegéd
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A heparán szulfátok (HS) lineáris sejtfelszíni poliszacharidok, melyek fontos szereppel bírnak számos biológiai folyamatban, beleértve a sejtek közötti kommunikációt, sejtfelszíni jelátvitelt, kötőszöveti mátrix stabilitást, valamint patogén-gazdasejt kölcsönhatásokat. A HS-lánc molekuláris kölcsönhatásait döntően befolyásolja negatív töltésmintázata, melyet glükurónsav/idurónsav egységein túl változatos szulfát módosításai határoznak meg. A szulfatáció kialakítását a HS lánc polimerizációját követően a bifunkciós *N*-dezacetiláz-*N*-szulfotranszferáz (NDST) enzimek kezdik meg, a glükózamin egységek *N*-dezacetilációjára és szulfatációjára. Ezen módosítások azonban nem egységesek a HS lánc mentén, emiatt a négy humán NDST izoenzim (NDST1–4) eltérő glükózamin mintázatokat alakít ki. Mivel az NDST enzimikus módosítások templátként szolgálnak a további HS-szulfatációt és epimerizációt katalizáló enzimek számára, az NDST-izoenzim működése alapvetően határozza meg az érett HS szerkezetét és kölcsönhatásait. Az idegszövetekben kifejeződő NDST3 a többi NDST-izoenzimhez képest kisebb szulfotranszferáz aktivitással rendelkezik, ennek molekuláris háttere az NDST3 részletes enzimikus jellemzése híján azonban jelenleg nem tisztázott.

Kutatómunkám célja az NDST3-enzim egyedi szulfotranszferáz specificitásának jellemzése volt. Ehhez irodalmi és fehérjemérnökségi megfontolások alapján kialakítottam egy olyan módszer folyamatot, mely révén hőstabil és enzimikusan aktív NDST-szulfotranszferáz doménfehérje konstrukciókat tudtam rekombinánsan termelni *E. coli* expressziós rendszerben. A sikeres fehérjetermeléshez megvizsgáltam az alkalmazott fehérjedomén-határokat, azonosítottam a fehérjetermelést és tisztítást legjobban elősegítő fúziófehérje-konstrukciót, valamint optimalizáltam a fehérje előállítás folyamatát. A módszerrel előállítottam az NDST3- és az NDST1-szulfotranszferáz fehérjéket, és egy fluorimetriás csatolt enzimesszé alkalmazásával jellemeztem az NDST3-izoenzim NDST1-nél kisebb enzimikus aktivitását. Összességében a fehérjetermelés és enzimaktivitás módszerek optimalizálása egy kísérletes rendszert alapozott meg az NDST1-4-enzimek szulfotranszferáz specificitásának összehasonlító jellemzésére, mely hozzásegíthet ezen izoenzim eltérő működésének és HS-bioszintézisben betöltött szerepének értelmezéséhez.

Genomi uracilmintázatok jellemzése: szenzorfejlesztés és funkcionális elemzés embrionális fejlődési modellben

Szajkó Milda Blanka, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Békési Angéla** egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
HUN-REN TTK, Molekuláris Élettudományi Intézet

Konzulens: **Holub Eszter** PhD-hallgató
ELTE TTK, Biológia Doktori Iskola
HUN-REN TTK, Molekuláris Élettudományi Intézet

Az uracil előfordulása a DNS-t felépítő nukleotidokban erősen korlátozott. A sejtek alapvetően hibaként értelmezik, és az uracil-DNS-glikozilázok által elindított báziskivágásos javítómechanizmussal eltávolítják [1]. Az uracil megjelenhet a sejtben a citozin-dezamináció és timint helyettesítő beépülés eredményeként. Utóbbi elkerülését az alacsony dUTP/dTTP arány biztosítja, melynek megzavarása régóta alkalmazott rákterápiás stratégia. Ugyanakkor a DNS-beli uracilnak lehet biológiai funkciója is, például szerepet játszik az immunválaszban [2] vagy a *Drosophila* metamorfózisa során zajló programozott sejtihalban [3].

A kutatócsoportunk legújabb eredményei szerint a zebrahal korai embrionális stádiumában megemelkedett a dUTP/dTTP arány és a DNS-beli uracil szintje is. A funkcionális jelentőségét alátámasztja, hogy ennek az állapotnak a megzavarása aktív dUTP-bontó enzim (dUTPáz) mikroinjektálásával, komoly fejlődési rendellenességekhez vezet. A csoport saját fejlesztésű uracil-DNS-immunprecipitációhoz kapcsolt szekvenálással (U-DNA-Seq, [4]) meghatározta a 2,5 órás zebrahal embriókban a genomi uracilmintázatot. Kutatásommal a megfigyelt megemelkedett genomi uracilszint egyedfejlődésbeli szerepének feltárásához szeretnék hozzájárulni. Ehhez bioinformatikai elemzéseket végeztem, melyek során a meghatározott uracilosodási mintázatot összehasonlítottam adatbázisból gyűjtött, zebrahal embriókból származó funkcionális genomikai adatokkal a GIGGLE Search programcsomag, valamint a Segway genomsegmentációs tanulóalgoritmus segítségével. Az uracilos régiók nagy átfedést mutatnak bizonyos szatellitákkal – köztük a centromérákkal kapcsolatba hozható BRSATI-gyel [5] –, és több transzkripció szabályozásban szerepet játszó fehérjével, valamint a hozzáférhető DNS-szakaszokkal is korrelálnak.

A DNS-beli uracil hatékony vizsgálatához kulcsfontosságúak a megbízható és érzékeny szenzorok. Laborunkban jelenleg is használunk uracil-DNS-glikoziláz alapú szenzorokat, azonban ezek érzékenysége és stabilitása a nehezen izolálható, komplex mátrixból kinyert és alacsony uraciltartalmú minták esetében nem mindig megfelelő. Ezért célom olyan fehérjeszenzorok fejlesztése, amelyek a korábbi stabil konstruktokat, az N'-terminálist megőrizve, kombinálják egy C'-terminális AviTaggel. Ez lehetővé teszi az enzimátikus biotinilálást, amely a specifikus biotin-avidin kölcsönhatás révén növeli a szenzorok érzékenységét és alkalmazhatóságát.

Referenciák (PMID): [1] 23545420; [2] 27585283; [3] 22685418; [4] 32956035; [5] 23594743

Oxidatív stressz kiváltotta sejthalál útvonalak vizsgálata tumoros sejtekben

Szentirmai Anna, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Szarka András** egyetemi tanár
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulens: **Varga Dóra** PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A redox homeosztázis fenntartása elengedhetetlen a normál sejtfunciók fenntartásához. Amennyiben ez az egyensúly felborul, és a reaktív oxigén származékok (ROS) termelődése meghaladja a sejtek antioxidáns kapacitását, a fellépő oxidatív stressz különböző működési zavarokhoz és végül sejthalálhoz vezethet. Ennek szerepét számos betegségben bizonyították már, beleértve például a diabéteszt, májkárosodást, és a tumorigenezist.

A túlzott mennyiségben keletkezett ROS többféle módon is károsíthatja a sejtek makromolekuláit. A lipidekben található telítetlen zsírsavak támadása révén lipidperoxidációhoz, fehérjékben a peptidkötések felhasadásához és keresztkötések kialakulásához vezethet. Megtámadhatja a nukleinsavakat, így a DNS-t is, ezáltal elősegítve a bázisok és cukorrészek módosulását, súlyosabb esetben lánctörések kialakulását. Számos sejthalál típus (nekrózis, apoptózis, nekroptózis, ferroptózis, autofágia) aktiválódását hozták már összefüggésbe oxidatív stresszel, ezen útvonalak pontos mechanizmusa azonban még nem teljesen tisztázott. Kutatásunk célja a farmakológiai aszkbát, rezveratrol, klorokin, menadion és az RSL3 citotoxikus hatása mögött álló molekuláris mechanizmusok felderítése. Ehhez szerettük volna tovább vizsgálni, hogy a különböző kezelőszerek külön-külön és együttesen alkalmazva milyen mechanizmussal okoznak sejthalált, melyek a hasonlóságok és különbségek a kiváltott folyamatok során, és melyik programozott sejthalál típusnak van szerepe az egyes esetekben. Ehhez alapvető molekuláris biológiai módszereket alkalmaztunk. Rákos sejtvonalakat kezeltünk a fent említett, potenciális terápiás szerekkel, majd ezek citotoxikus hatását MTT életképességi assay segítségével elemeztük. A kiváltott DNS károsodást Western-blot technikával mutattuk ki, míg a sejtek energiaszintjét a NAD⁺ és az ATP mennyiségének HPLC-UV/Vis technikával való meghatározásával mértük. Áramlásos citométer segítségével követtük nyomon a sejtekben kialakuló oxidatív stresszt különböző oxidációra érzékeny fluoreszcens festékekkel (DCF, BODIPY), valamint az okozott sejtciklus-megállást FxCycle reagenssel. Végül a kaspáz enzimaktivitást egy fluoreszcens szubsztrátot tartalmazó kit alkalmazásával vizsgáltuk.

Megállapítottuk, hogy mind az öt kezelőszerek okoz DNS károsodást, és a klorokin kivételével emelkedett ROS szintet, de lipidperoxidációt csak a farmakológiai aszkbát és a menadion váltott ki. Az aszkbától kívül mindegyik hatására megakadt a sejtciklus, bár eltérő fázisokban. Kaspáz aktivitást csak a rezveratrol esetében mértünk. Mindezek alapján elmondhatjuk, hogy ezek a kezelőszerek részben hasonló, részben eltérő módon fejtik ki hatásukat, a háttér-folyamatok ismerete révén kiaknázzhatjuk a köztük lévő szinergikus hatást a megfelelő koterápia megtervezéséhez.

Az oxidatív stressz folyamatainak befolyásolása számos tanulmány szerint hatékony terápiás célpont lehet, mind a diabétesz és a rák, valamint számos más betegség kezelésében is. Az ezek során végbemenő sejthalál-folyamatok útvonalainak pontosabb megismerése segítséget nyújthat a sejtkárosodás mérséklésére, valamint a betegségek előrehaladásának lassítására alkalmas gyógyszerek kifejlesztésében.

A sejtciklus során stabil mRNS-expresszióval rendelkező referenciagének vizsgálata

Tóth Máté, II. évf. (MSc)

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

Konzulens: **Nagy Nikolett** tudományos munkatárs
Természettudományi Kutatóközpont
Tóth Otília PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A reverz transzkripcióval kapcsolt kvantitatív PCR napjaink egyik leggyakrabban alkalmazott molekuláris biológiai módszere. Széles körben használják tudományos kutatások, valamint orvosdiagnosztikai eljárások során. Az mRNS-expresszió meghatározásához megfelelő referenciagének kell alkalmazni, ezek megtalálása azonban komoly kihívást jelent. A kutatócsoportban már sikeresen azonosítottak különböző humán sejtvonalak között jól alkalmazható referenciagéneket. Munkám során két humán rákos sejtvonalon (U937, MOLT4) vizsgáltam a korábban már alkalmazott referenciagének (*RPL30*, *SNWI*, *PUM*, *ACTB*, *TBP*, *HNRNPL*, *CNOT4*, *PPIA*, *GAPDH*, *UBC*, *PCBP1*, *IPO8*) mRNS expresszióját a sejtciklus során RT-qPCR technikával. Ahhoz, hogy információt szerezhessenek az adott sejtciklus fázisra jellemző expressziós mintázatokról a sejteket szinkronizálnom kellett, majd eltérő időpontokban vizsgálni a mintákat. A szinkronizálás sikerességét FACS módszerrel ellenőriztem. Az RT-qPCR mérésekből nyert adatokat három különböző, egymástól független módszerrel értékeltem ki, melyek az összehasonlító deltaCt módszer, a BestKeeper és a NormFinder szoftverek voltak. Célom volt olyan referenciagének azonosítása, amelynek expressziója stabil marad a teljes sejtciklus alatt, így segítve a sejtciklus-függő folyamatok vizsgálatát, amelynek jelentős szerepe van a rákkutatásban. Eredményeim alapján mindkét sejtvonalon esetén sikerült megfelelő referenciagéneket azonosítanom, a MOLT4 sejtvonalon a *CNOT4*, *TBP*, *GAPDH* géneket, míg az U937 sejtvonalon az *SNWI*, *TBP* és *RPL30* géneket. Az eredmények összegzése alapján sikeresen találtam mindkét sejtvonalon stabil sexpresszióval rendelkező referenciagéneket is, amelyek az *SNWI* és *GAPDH* gének. Az elért eredmények nagy segítséget jelentenek a sejtciklus-függő génexpressziós vizsgálatok tervezésében. Kutatómunkám továbbá arra is felhívja a figyelmet, hogy minden sejtvonalon esetén kritikus a referenciagének stabilitásának ellenőrzése.

A biofilmképződésben szerepet játszó jelátvivőmolekulák antimikrobiális peptidekkel képzett szupramolekuláris asszociátumai

Ujvári Kamilla, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Szigyártó Imola Csilla** tudományos munkatárs
HUN-REN TTK, AKI Biomolekuláris Önrendeződés Kutatócsoport
Dr. Beke-Somfai Tamás tudományos főmunkatárs
HUN-REN TTK, AKI Biomolekuláris Önrendeződés Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Pusztai Éva** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Az antibiotikum rezisztens kórokozók egyre nagyobb veszélyt jelentenek nemcsak az emberi egészségre nézve, hanem a teljes élővilágra. A szakértők szerint 2050-re az antibiotikum rezisztencia lesz a vezető halálozási ok, évente akár 10 millió halálesetet okozva. ^[1] A bakteriális fertőzések jelentős hányadánál biofilm képződés is fellép, ami nehezebben kezelhetővé teszi a fertőzést, valamint elősegíti a rezisztencia kialakulását. ^[2] Az antimikrobiális peptidek használata ígéretes megközelítést jelenthetnek a biofilmmel kapcsolatos fertőzések kezelésére, a sejtek közti kommunikáció megakadályozásával. Ezt a kommunikációs folyamatot quorum érzékelésnek (QS) nevezzük, melynek során a baktériumok jelátvivő molekulákkal képesek szabályozni a biofilm méretét, az alkotó sejtek fenotípusát, a populáció számot és virulencia faktorokat.

Elővizsgálatainkban kimutattuk, hogy a humán LL-37 antimikrobiális peptidkomplexet képez a pszeudokinolon jelzőmolekulával (PQS). ^[3] Vizsgálatainkat kiegészítettük további természetes és mesterséges eredetű membránaktív peptid és QS-ben szerepet játszó jelzőmolekulák kölcsönhatásának tanulmányozásával. A jelátvivő molekulák királis asszociátumokat képeztek a peptidekkel, melynek jellemzésére cirkuláris dikroizmust és infravörös spektroszkópiát, valamint az aggregátumok jelenlétének bizonyítására dinamikus fényszórást és transzmissziós elektronmikroszkópiát alkalmaztunk. Az ígéretes kombinációkat emlősök és baktérium sejtmembrán modelleken tovább vizsgáltuk a biofilm átjárhatóság mechanizmusának megértésére.

Referenciák:

1. Murray, C. J., Ikuta, K. S., Sharara, F., et.al, (2022). Global burden of bacterial antimicrobial resistance in 2019: a systematic analysis. *The Lancet*, 399(10325), 629–655. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(21\)02724-0](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(21)02724-0)
2. Galdiero, E., Lombardi, L., Falanga, A., et.al, (2019). Biofilms: Novel strategies based on antimicrobial peptides. In *Pharmaceutics* (Vol. 11, Issue 7). MDPI AG. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics11070322>
3. Zsila, F., Ricci, M., Szigyártó, I. C. et.al, (2021). Quorum Sensing Pseudomonas Quinolone Signal Forms Chiral Supramolecular Assemblies With the Host Defense Peptide LL-37. *Frontiers in Molecular Biosciences*, 8. <https://doi.org/10.3389/fmolb.2021.742023>

Mélyhűtött sütőipari termékek minőségjavításának lehetőségei

Gasparics Kata, IV. évf. (BSc)

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi tanszék

Dr. Jaksics Edina tudományos segédmunkatárs

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi tanszék

A sokkolással készült mélyhűtött sütőipari termékek jelentősége az utóbbi években-évtizedekben, rengeteget nőtt. Egyre szélesebb körű alkalmazásának oka, az eltarthatósági-, és minőségmegőrzési idő növelése mellett a készre sütött termékek gyors előállításának lehetősége. Nem megfelelő alapanyag, technológia, eljárás alkalmazása esetén, azonban a sikérszerkezet károsodhat, az élesztő vagy a kovász enzimeinek aktivitása csökkenhet, a tárolás során az amilopektin retrogradációja játszódhat le. Mindezek a frissen készült termékekhez képest kedvezőtlenebb élvezeti értékű, kisebb fajlagos térfogatú és keményebb bélzetű termékeket eredményezhetnek. A kedvezőtlen hatások kiküszöbölésére az ipar többféle megoldást jelenleg is alkalmaz, mint például adalékanyagok használata, a gyorsítás folyamatának optimalizálása, a gyártás automatizálása, ezzel a változékonyság, a termékminőség standardizálása. Ugyanakkor az alapanyag (a lisztek, gabonaőrlemények) termékminőségre gyakorolt hatása, annak elméleti összefüggései, az irodalomban is csak részben feltártak. Különösen igaz ez az egészségesebb, rostokban gazdag sütőipari termékekre, ahol a rosttartalom növelése jelentősen módosíthatja a tészták viszkózus-, és dagasztási tulajdonságait, a bélzet szerkezetét és annak stabilitását.

Kutatómunkám alapvető célja az őrlemény alapanyagok összetételi és reológiai tulajdonságai és az elősütött sokkolt és mélyhűtve tárolt termékek minősége közötti összefüggések vizsgálata, valamint speciális búzarostfrakciók alkalmazási lehetőségeinek tanulmányozása. Mivel ehhez sem laboratóriumi technika, sem vizsgálati módszertan nem állt korábban rendelkezésre, munkám első fázisában ezek megteremtésén dolgoztam. Ezt követően vált lehetségessé különböző lisztminőségű, eltérő fehérje (siker) és szénhidrátösszetételű és rosttartalmú alapanyagok vizsgálata. Az eltérő összetételt részben alapanyagválasztással, részben lisztkeveréssel valósítottam meg. Vizsgáltam az őrlemények összetételét, reológiai tulajdonságait, a végtermékminőséget és mindezt összehasonlítottam a fagyasztási technológiai nélkül előállított termékek tulajdonságaival.

Eredményeim alapján egyértelmű, hogy az alaplisztek jelentős eltérést mutatnak a reológiai tulajdonságok tekintetében – vagyis ezek megfelelőnek tűnnek a tervezett cél elérése szempontjából. A keveréssel megváltoztatott szénhidrát és rostösszetételű őrlemények tulajdonságai részben nem várt módon, eltérő irányban változtak, összességében az alapanyagok közötti eltéréseket csökkentették. Ugyanakkor a végtermék minőség változása nem egyirányú – ismét ráirányítva a figyelmet az összetétel-reológia-végtermékminőség közötti bonyolult viszonyokra. A jelenségek értelmezése folyamatban van. Dolgozatomban az új kutatási terület elért eredményeit összegzem.

Extracelluláris vezikulák glikomikai karakterizálása

Horváth Virág Nikolett, I. évf. (MSc)

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

Az extracelluláris vezikulák (EV-k) lipidekkel határolt részecskék, melyeket az extracelluláris környezetbe szabadítanak fel a sejtek, és amelyek kulcsfontosságú szerepet játszanak az intercelluláris kommunikációban. A változatos biomolekulákat tartalmazó, 30–150 nm-es mérettartományba eső kisméretű extracelluláris vezikulák (small extracellular vesicle, sEV) az EV-k egy alsóportja, melyek kardinális szerepet töltenek be a rák kialakulása során, emiatt vizsgálatuk rendkívül fontos.

Munkám célja az A549 tüdő adenokarcinóma sejtvonalból, valamint a BEAS-2B nem tumoros sejtvonalból izolált sEV fehérjék glikozilációs poszt-transzlációs módosulásainak (*N*-glikoziláció, kondroitin-szulfát (CS) glükózaminoglikánok (GAG)) karakterizálása volt. A kétféle sejtvonal sEV-inek izolálásához 72 óra tenyésztést, valamint centrifugálási és szűrési lépést követően mini méretkizárásos kromatográfiát végeztem saját készítésű oszlopokon. A sEV-kben gazdag frakciókat betöményítettem, oldószercserét végeztem, majd fagyasztási-olvasztási ciklusokkal tártam fel a sEV-eket. A 6-6 párhuzamosban izolált vezikulákból a feltárást követően a mintákat tripszinnel, illetve kondroitináz ABC enzimekkel emésztettem meg, ezáltal az azokat alkotó fehérjéket peptidekké, a CS GAG-okat pedig CS-diszacharidokká hasítottam. A triptikus emésztményből az *N*-glikopeptideket acetonos kicsapás segítségével dúsítottam. Tisztítás után nanoUHPLC-MS(MS)-sel analizáltam a minták *N*-glikopeptid és CS-diszacharid összetevőit.

A proteomikai vizsgálatok megerősítették a nagy tisztaságú EV-k jelenlétét, amelyek alapvető referenciaként szolgáltak a vezikulák későbbi glikomikai elemzéseire. A CS diszacharidok és az *N*-glikoproteomikai eredmények alapján mind a főkomponens-analízis, mind a hierarchikus klaszterezés alapján egyértelműen elkülönült a két mintacsoport. A statisztikai elemzések során szignifikáns változások voltak kimutathatók a két mintacsoport között a CS diszacharidok összmenyiségei, az egyszerűen szulfatált CS diszacharidok relatív mennyiségei, valamint a 6S/4S arányok között. Az *N*-glikoproteomikai analízis során az A549-hez tartozó mintáknál 216 db *N*-glikopeptidet sikerült azonosítani 58 db *N*-glikoproteinből, a BEAS-2B-hez tartozó mintáknál pedig 248 db *N*-glikopeptidet sikerült azonosítani 73 db *N*-glikoproteinből. Az azonosított *N*-glikopeptidek többsége komplex típusú volt. Mindkét csoportban jelen voltak olyan glikozilált marker fehérjék, mint pl. a tromboszpondin-1, ill. a galektin-3 kötő fehérje, ezenkívül sok proteoglikán vázfehérje *N*-glikozilációja is jellemezhető volt. Eredményeim egyértelműen rávilágítanak a kétféle sejtvonal közötti biokémiai különbségekre, amelyek a későbbiekben kulcsfontosságúak lehetnek akár új gyógyszeres támadáspontok felfedezésében.

Gyógyszerindukált neuropszichiátriai mellékhatások sejtszintű mechanizmusának vizsgálata humán monocita sejtmodellel

Szabó Katalin, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Onódi Zsófia** egyetemi adjunktus
SE Farmakológiai és Farmakoterápiás Intézet
Konzulens: **Dr. Balogh György Tibor** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A klinikumban alkalmazott gyógyszerek sokféle mellékhatást okozhatnak a kívánt terápiás hatásokon kívül. A potenciálisan pszichiátriai zavarokat okozó gyógyszerek egy részét olyan gyakori betegségekben alkalmazzák, mint az asztma vagy az epilepszia, így ezen mellékhatások (pl. hangulatzavar, agresszió vagy öngyilkossági gondolatok) jelentősége kiemelt. Nem ismert azonban ezen gyógyszerek által okozott pszichiátriai zavarok pontos mechanizmusa, így sokszor csak a klinikai gyakorlatban ismerik fel a hatóanyagok ezen mellékhatásait. Ismert, hogy a központi idegrendszerben megtalálható speciális sejt típus, a monocita eredetű mikroglia és az általa is kialakított idegrendszeri gyulladás (neuroinflammáció) is szerepet játszhat a folyamatban. Kutatásaim során célul tűztem ki sejt modellel vizsgálni a gyógyszer hatására kialakuló jellemző molekuláris változásokat, hogy későbbiekben in vitro módszerekkel kimutatható lehessen az ilyen típusú mellékhatások rizikója már a gyógyszertervezés korai szakaszában.

Kísérleteim során három, a gyakorlatban korábban is használt gyógyszermolekula (montelukast, levetiracetam, rimonabant) neuropszichiátriai mellékhatásával foglalkoztam. A sejt kultúra kísérleteket THP-1 humán monocita sejt vonallal végeztem, amelyeket 24 óráig kezeltem a hatóanyagok változó koncentrációival. Vizsgáltam a sejt túlélést Trypan Blue vitális festéssel a hatóanyagok toxicitásának megállapítására. Külön kísérletben a sejtekből izoláltam a teljes RNS-tartalmat, majd complement DNS-könyvtárat készítettem, végül saját tervezésű primer templátokkal a kinurenin útvonal és egyes gyulladásos mediátorok génjeinek expresszióját megmértem valós idejű kvantitatív polimeráz láncreakció (qRT-PCR) vizsgálattal.

Vizsgálataim alapján a nagy dózisú montelukast (MON, 10 μ M) toxikus volt a sejtekre, mivel a sejtek 80-90%-a a kezelés végére elpusztult. A levetiracetam (LEV) és rimonabant (RIM) kezelésénél nem láttunk jelentős pusztulást. A PCR vizsgálatok alapján nem figyeltünk meg jelentős változásokat a THP-1 kinurenin metabolizmusában, továbbá a gyulladásos paraméterek sem változtak szignifikánsan, bár tendenciózus, nem specifikus változások izoláltan megfigyelhetők voltak néhány hatóanyag egyes dózisai esetében.

Eredményeim alapján megállapítottam, hogy az alkalmazott modellel nem mutatható ki az útvonalak érintettsége a hatóanyagokkal történt kezelés után. Ennek oka feltehetően a sejt vonal sajátosságaiban és a mikroglia-tól való fenotípus eltéréseiben rejlik, így a jövőben mikroglia sejt kultúrán és rágcső modellel is elvégezzük a mérést.

Szemcseméret valós idejű meghatározása pelletterétegezés során gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Demeter Kincső Renáta, IV. évf. (Bsc)

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

Konzulens: **Péterfi Orsolya** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A szemcseméret egy fontos minőségi jellemző, amelynek ellenőrzése a gyógyszeripari folyamatokban kiemelt jelentőségű. Például a pelletekre rétegezéssel felvitt hatóanyag mennyisége szorosan összefügg a szemcsemérettel, így ennek vizsgálatával a hatóanyag-tartalomról is információt kapunk. A munkám célja egy olyan mérési módszer kifejlesztése volt, amely során egy in-line képalkotó rendszer segítségével valós időben meghatározható a pelletek szemcsemérete egy rétegezési eljárás során, ahol hatóanyagot tartalmazó bevonatot viszünk fel pelletekre.

A munkám során kifejlesztett képalkotó rendszer egy digitális kamerára rögzített endoszkóp segítségével lát bele a pellet rétegező készülékbe. Először off-line teszteltem a rendszer alkalmasságát szemcseméret mérésre, mely során egy 3D-nyomtatott készülékben fluidizáció során felvételeket készítettem inert pellet magokról. A szemcsék felismerését konvolúciós neurális háló segítségével valósítottam meg. Az algoritmus tanításához egy tanító adathalmazt hoztam létre, amely olyan képekből állt, amelyeken a fókuszban lévő, jól látható pelleteket bejelöltem. Tanítást követően a modell sikeresen felismerte a megfelelő minőségben látható pelleteket.

A részecskék felismerését végző modellt in-line teszteltem fluidizációs készülékben végzett pellet rétegezés követésével. A rétegezés során mikrokristályos cellulóz pelletmagokat használtam, a magokra porlasztott kötőanyag oldat tartalmazta a hatóanyagot (ibuprofén-nátrium), tehát a bevonás során nőtt szemcseméret és a pelletek hatóanyag-tartalma is. Az endoszkópos rendszer segítségével felvételeket készítettem a pelletekről és az algoritmus által bejelölt pellet körvonalak alapján meghatároztam a pelletek szemcseméretét. A módszer pontosságának ellenőrzésére off-line referencia módszerként dinamikus képelemzést, illetve lézerdiffrakciót használtam. Ezek a mérések hasonló eredményeket adtak az én módszeremmel in-line mért értékekhez.

A mesterséges intelligencia által bejelölt körvonal segítségével meghatároztam a szemcsék alakjait: a cirkularitást és hosszúság/szélesség arányt. Referencia módszerként mikroszkópos felvételeket és off-line dinamikus képelemzést használtam, a módszerem jó egyezést mutatott ezekkel.

Az eredmények alapján elmondható, hogy sikerült kidolgoznom egy olyan módszert, ami valós időben, mesterséges intelligencia alapú segítségével lehet meghatározni a pelletek szemcseméret-eloszlását és alakját pellet rétegezés során.

Mesterséges neurális háló-alapú modell fejlesztése granulátumok nedvességtartalmának in-line nyomon követésére

Fekete Dániel, II. évf. (MSc)

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

Konzulens: **Záhonyi Petra** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszeriparra hagyományosan jellemző szakaszos technológiákat egyre jobban felváltják a folyamatos technológiák, melyeket gyakran egy egységként, akár a nyersanyagoktól a végső gyógyszerig, integrálva fejlesztenek és működtetnek. Egy ilyen összetett rendszer használata során szükség van a folyamat minél mélyebb megértésére, amit a hagyományosan alkalmazott minőség-ellenőrzési gyakorlattal – angolul Quality by Testing (QbT) – nem lehet megtenni. A QbT helyett megszületett a tervezett minőség, a minőségbiztosítási gyakorlat – angolul Quality by Design (QbD) – fogalma, mely segítségével megérthető, hogy az anyagi jellemzők és a folyamatparaméterek változása miként befolyásolja a termék minőségét. Ezeket a rendszereket folyamatfelügyelő és analizáló technológiák – angolul Process Analytical Technologies (PAT) – alkalmazásával lehetőség van valós időben, in-line nyomon követni. PAT-rendszerként kiválóan alkalmazhatóak spektroszkópiai módszerek, mint például a közeli infravörös spektroszkópia – angolul Near Infrared Spectroscopy (NIR) –, valamint egy még modernebb irányzat, a szoftveres érzékelők – angolul soft sensors – alkalmazása is egyre jobban elterjed. A szoftveres érzékelők használata során a termék várható tulajdonságai közvetetten, kizárólag mért folyamatparaméterek alapján becsülhetőek anélkül, hogy direkt mérésre lenne szükség.

Munkám során egy elterjedten alkalmazott készítménytechnológiai eljáráson, az ikercsigas nedves granuláláson alapuló integrált, folyamatos rendszer működését vizsgáltam. Mivel a granulátumok nedvességtartalma nagymértékben meghatározza a termék minőségét, célom volt ennek a tulajdonságnak az in-line, valós idejű követése, továbbá annak megállapítása, hogy a különböző gyártási paraméterek hogyan befolyásolják azt. Ennek megvalósításához követtem a granulátumok maradék nedvességtartalmát és az aktuális gyártási paramétereket, hogy felderíthessem a közöttük lévő összefüggéseket. Ennek követésére először NIR-spektroszkópiát használtam PAT-eszközként, mely az adatokat gyorsan, in-line, valós időben és roncsolásmentesen képes mérni. Ezután kidolgoztam egy még modernebb módszert, amivel közvetett módon tudtam becsülni a nedvességtartalmat, kizárólag a rögzített gyártási paraméterek alapján mesterséges neurális háló alkalmazásával. Ennek köszönhetően az érzékeny és drága NIR-spektroszkópia leváltható, az in-line követés már enélkül is megvalósítható.

Félfolyamatos neutrális hidrolitikus eljárás fejlesztése PET kémiai újrahasonosítására

Hegyi Mihály, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Székely Edit** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Béri János** doktorjelölt
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A polietilén-tereftalát [PET] a világon legnagyobb mennyiségben gyártott polikondenzációs polimer; ipari méretben megvalósult újrahasonosítása nagyrészt a mechanikai újrahasonosítási technológiákra épít [1]. A technológia nehezen vagy nem képes szennyezettebb hulladékáramokat feldolgozni, ezeknél a kémiai újrahasonosítás lehet a megoldás. Ennek során a polimerből értékes bomlástermékeket nyerünk, például a monomereket, amikből friss polimer szintetizálható. A PET esetében a hidrotermális bontás egy még nem kellőképpen kidolgozott, de nagy potenciállal rendelkező technológiai csoportot alkot. A víz alkalmazása zöld, olcsó, egyszerűen kezelhető közeget jelent, de az irodalomban fellelhető hidrolitikus eljárásokkal elérhető termelékenység és terméktisztaság sok esetben elmarad a rivális technológiáktól.

Munkámban a PET neutrális hidrolízisét vizsgáltam saját fejlesztésű félfolyamatos készülékünkben. A polimer felett folyamatosan cserélődő víz elősegíti a reakció előrehaladását a termékek folyamatos eltávolításán keresztül. A hidrolízist a 250–300°C-os hőmérséklet-tartományban, 10–30 MPa nyomáson vizsgáltam, az alapanyag teljes konverziójához 14–35 perc szükséges. A pH szabályzásán keresztül stabilizált atmoszférikus oldatból a termék TPA kinyerése egyszerű savadagolást követő szűréssel megvalósítható, a preparatív hozam 76–100% között alakult. A hőmérséklet emelése kisebb reakcióidő mellett magasabb preparatív hozamot eredményez. A preparatív termék tereftálsav [TPA] tisztasága rendkívül jó, az NMR-spektrumban kevés, nem kvantitatívan meghatározható a szennyezők mennyisége.

A folyamat lefutását frakcionált mintavételt követő folyadékromatográfiás vizsgálattal végeztem. Míg a nyomás nem fejt ki szignifikáns hatást a folyamatra a 10–30 MPa-os tartományban, a hőmérséklet növelése gyorsítja a reakciót. A TPA-készülék végén tapasztalható koncentrációprofilja kvalitatívan változik a vizsgálati tartományban. Ennek okát tartózkodási idő-eloszlás mérések segítségével vizsgáltam. Az eloszlást NaCl-oldatát, mint nyomjelzőt használva mértem; a kapott eloszlást a bontási kísérletekkel összehasonlítva megállapítható, hogy a hőmérséklet emelésével fokozatosan a TPA kimosódása válik a domináns, sebességmeghatározó részlépéssé. Ennek eredményeképpen a hőmérséklet 285 °C fölé emelése nem gyorsítja számottevően a teljes bontási folyamat lefutását.

A készüléket 20-szoros méretnövelésnek vettem alá, hogy a reaktor belsejében megismerhető legyen a fázisok viselkedése a bontási folyamat befagyasztásával.

[1] Plastics Europe: The circular economic for plastics. An European overview, 2024

Porkeverék komponensenkénti szemcseméret-eloszlásának meghatározása gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Kálnai Áron, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Galata Dorián László** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Ficzere Máté** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszeriparban az utóbbi években jelentős eltolódás figyelhető meg a hagyományos szakaszos gyártástól a folyamatos gyártási technológiák irányába. Ennek a változásnak legfőbb célja a fokozott biztonság és minőség-ellenőrzés. Ez az átmenet nagy figyelmet von magára és ennek keretein belül egyre nagyobb hangsúly kerül a különböző, gyógyszeriparban használt porok, valamint granulátumok vizsgálatára. Az újabban végzett fejlesztések során elsősorban az in-line vizsgálati módszerek élveznek prioritást, melyek segítségével valós idejű információk nyerhetők és a különböző folyamatok paramétereinek ellenőrzésének optimalizálásában is előrelépések érhetők el.

A gyógyszeriparban felhasznált porkeverékek szemcséinek két legfontosabb tulajdonsága a méretük és az alakjuk. Ezek a paraméterek kihatnak a készítmény feldolgozására, gyártására és a hatásosságára is, így az egyes komponensek tulajdonságainak ismerete és kontrollálása nagy jelentőséggel bír. Különösen fontos, hogy a porkeverékeket alkotó komponensek tulajdonságait külön-külön ismerjük, hiszen azok az adott készítményben betöltött eltérő funkciójukhoz hasonlóan más és más karakterisztikájúak.

Munkám célja egy olyan technológia kifejlesztése volt, mely gyógyszeripari porkeverékek teljes, valós idejű átvizsgálására használható és ami képes a porkeverékeket alkotó komponensek szemcséinek külön-külön történő vizsgálatára. Hipotézisem az volt, hogy egy gépi látáson, mesterséges intelligencián és képelemzésen alapuló rendszer képes lehet porkeverékek szemcséinek felismerésére, az egyes komponensek megkülönböztetésére és a komponensenkénti szemcseméret-eloszlás meghatározására.

Az objektumok (szemcsék) felismerését a YOLOv5 neurális hálóval, a felismert szemcsék méretének meghatározását pedig klasszikus képelemzéssel, egy saját készítésű Matlab algoritmus segítségével végeztem. Végeredményben a fejlesztett módszer képes volt a porkeverékekről készített videókban található eltérő komponensek szemcséinek felismerésére és az egyes anyagokhoz tartozó szemcseméret-eloszlások meghatározására, melyhez a felismert részecskék minimális Feret-átmérőjét használta. Az in-line rendszerrel kapott eredményeket ismert nagyítású mikroszkóppal készített képek elemzésével validáltam. A két módszer eredményei minden esetben jó egyezést mutattak, így a fejlesztett technológia in-line alkalmazásban hatékonynak és pontosnak bizonyult. Ezt kihasználva a módszer beépíthető a gyártási folyamatokba, hatékonyabbá téve a valós idejű adatgyűjtést, ezáltal nagy előrelépést hozva a gyógyszeripari minőségbiztosításban.

Klomipramin kulcsintermedier szintézisút és technológia fejlesztése

Molnár Bence Csaba, I. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Szabó Tamás** kutatási és fejlesztési igazgató

SONEAS Vegyipari Kft.

Dr. Orha László kutatási és fejlesztési csoportvezető

SONEAS Vegyipari Kft.

Konzulensek: **Dr. Hell Zoltán Károly** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Lakné Dr. Komka Kinga egyetemi adjunktus

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A klomipramin az 1960-as években felfedezett pszichoaktív (CNS) gyógyszer-hatóanyag, melyet a mai napig mentális betegségek esetén széles körben alkalmaznak. A triciklusos antidepresszánsok (TCA) közé és a dibenzazepinek családjába tartozó vegyület szerepel a WHO-nélkülözhetetlen hatóanyagok listáján. A klomipramin gyártásközi intermedierjeinek előállítása ugyanakkor számos kihívást rejt.



A TDK-dolgozatom témája a klomipramin szintézisútjának és gyártástechnológiájának korszerűsítése. Munkám során a klomipramin egyik kulcsintermedierjének, a 3-klór-5-acetiliminodibenzil vegyületnek az előállítására keresek új kémiai módszereket. Célom a kémiai fejlesztés során olyan eljárás kidolgozása, mely pénzügyi, biztonságtechnikai és környezetvédelmi szempontok alapján a korábbiakhoz képest kedvezőbb tényezőkkel rendelkezik.

Eukaliptol, mint biomassza-alapú oldószer, alkalmazása Sonogashira-reakcióban

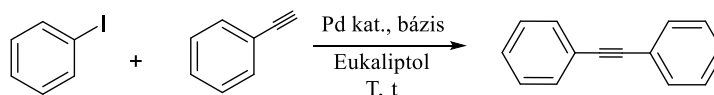
Pákai Tamás, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Mika László Tamás** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Árvai Csaba** PhD-hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A palládiumkatalizált Sonogashira keresztkapcsolási reakció egy rendkívül hatékony eljárás új szén–szén kötések szelektív kialakítására. A reakció többek között alkalmas biológiailag aktív komplex molekulák előállításához.¹ Előnye, a rendkívül jó funkcióscsoport-tolerancia, magas szelektivitás, és a könnyű méretnövelhetőség. Számos jelentős ipari és akadémiai alkalmazása ismert. A reakció hatékonyságát számos paraméter befolyásolja például a választott katalizátorprekursor, az oldószer, és a reakció megvalósításához szükséges bázis karaktere. A reakciót több esetben fosszilis eredetű, poláris, aprotikus oldószerben pl. DMF, DMSO, stb. végzik. Ezen közegek kiváltása, biomassza-alapú, alacsony gőznyomással és toxicitással rendelkező alternatívával, az eljárás környezetre gyakorolt káros hatása csökkenthető.²

Az eukaliptol (1,8-cineol) egy nem illékony, áttetsző folyadék, amely nagy mennyiségben nyerhető ki az eukaliptuszfák leveleiből. Biztonságos vegyszerként van számotartva, kis mennyiségben nem mérgező, sőt pozitív hatással bír, például gyulladáscsökkentő hatású. A vegyület potenciális oldószere lehet a Sonogashira-reakciónak, leváltva a konvencionális toxikus, illékony oldószereket.³

Előadásomban az eukaliptol oldószerben elvégzett Sonogashira-kapcsolás eredményeit mutatom be. A kutatómunkám során a reakció optimalizálását végeztem el jódbenzol és fenilacetilén kapcsolásán keresztül, mint modellreakció. Majd az optimalizált körülmények között a jódaromás és acetilénszármazékon keresztül a reakció funkcióscsoport-toleranciáját, ill. elektronikus tulajdonságának hatását vizsgáltam. A modellreakció egyenlete és általános körülményei az 1. ábrán láthatók.



1. ábra: Általános reakcióegyenlet.

Referenciák:

¹Gazvoda M.; Virant M.; Pinter B.; Košmrlj J. Mechanism of copper-free Sonogashira reaction operates through palladium-palladium transmetalation. *Nature Communications*, **2018**, *1*, 1-9.

²Molnár K.; Hermeicz I. A Sonogashira-Hagihara keresztkapcsolási reakció. *Magyar Kémiai Folyóirat*, **2011**, *4*, 194-201.

³Joana F. Campos; Sabine B. R. Eucalyptol, an All-Purpose Product. *Catalysts* **2022**, *1*, 1-22.

Mikrotálcák PVDF-szűrőmembránjának kémiai funkcionálizálása

Spátay Sára, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Tóth Tünde** habil. egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Góls Ádám posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulensek: **Prof. Dr. Huszthy Péter** Professor Emeritus, az MTA rendes tagja

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Ádám Bálint Árpád PhD-hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A mikrotálca alapú rendszerek a nagy áteresztőképességű kísérletek egységes és egyezményes platformjai. Ezeket a polimereszközöket világszerte napi szinten használják - főként a gyógyszeriparban - párhuzamos szintézisek, reakcióoptimalizálás, különböző preklinikai vizsgálatok és nagy áteresztőképességű szűrési módszerek során. Ennek megfelelően a laboratóriumi automatizálás általános célja ezen kereskedelmi forgalomban kapható eszközök kezelése, a módosításukra összpontosító fejlesztések a modern alkalmazott kutatások kiemelt területei. Egy általánosítható módszerrel lehetővé tettem porózus PVDF polimer kovalens funkcionálizálását, mely a széleskörűen alkalmazott szendvics rendszerű szűrőtálcák membránja. Az indifferens membrán felületi aktiválását követően kovalensen kapcsolt monofunkciós linkerek segítségével tetszőleges további kémiai funkcionálizálás valósítható meg. A kutatás során a jövőbeni adaptálhatóságot szem előtt tartva az iparilag széles körben elterjedt atmoszférikus nyomású levegőplazmát és két különböző kémiai felületkezelést dolgoztam ki és hasonlítottam össze a gyakorlati megvalósítás, a polarizációs hatások, a funkcionálizálás hatékonysága, valamint a morfológiára és a porozításra gyakorolt hatás szempontjából. Az összehasonlításhoz nedvesítési szög méréseket, felületi ATR-FTIR, ¹H-NMR-, ¹⁹F-NMR-, UV-Vis-spektroszkópiás és pásztázó elektronmikroszkópiás méréseket, valamint permeabilitási vizsgálatokat végeztem.

Probiotikus kakaópor készítmény előállítás folyamatos üzemű granulálási technológiával

Szeip Judit, I. évf. (MSc)

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

A probiotikus készítmények jelentősége folyamatosan nő napjainkban [1]. A szervezet mikrobiomjának megfelelő egyensúlyban tartásával megelőzhetők különböző betegségek, ezért érdemes olyan jótékony baktériumokat bejuttatni a szervezetünkbe, amelyek támogatják a bélflóra egészséges működését. A probiotikumok beviteléhez azonban célszerű olyan készítményeket fejleszteni, melyek akár gyermekek számára is könnyen alkalmazhatók. Ilyen termékek lehetnek például a kakaópor alapú probiotikum-tartalmú készítmények.

Az instant kakaóitalok nagy népszerűségnek örvendenek a gyors és egyszerű elkészítésüknek köszönhetően, főleg a gyermekek körében [2]. Ezeknek a készítményeknek a legalapvetőbb összetevője a kakaópor, ami azonban a benne található kakaóvaj és egyéb hidrofób összetevők miatt nagyon rosszul oldódik vízben és tejben egyaránt, ezért az instant kakaóitalok gyártási technológiája során a kakaópor nedvesíthetőségén és oldhatóságán javítani kell. Másrészt a kakaópor rossz porfolyási tulajdonságait is fontos kiküszöbölni az egyszerűbb adagolhatóság elősegítése végett. A hatékony gyártás megvalósításához és a porfolyási tulajdonságok javításához a granulálás egy ígéretes módszer lehet, mely egy gyakran alkalmazott, folyamatos üzemmódban is megvalósítható technológia [3]. Ennek egyik típusa a nedves granulálás, ahol valamilyen folyadékot használnak kötőanyagként a szemcsék összetapasztására, az agglomerátumképzésre. Ez a módszer alkalmas lehet arra, hogy kakaópor alapú probiotikum-tartalmú készítményeket gyártsunk, így a gyermekek számára fejlesztett probiotikumok palettája bővíthetővé válhat.

Kutatómunkám célja ezért egy probiotikus kakaópor előállítása volt. Céлом eléréséhez egy olyan baktérium integrációját végeztem el a kakaóporba, amely segíti a bélflóra működését. A kiválasztott törzs a *Lactobacillus acidophilus* volt, ami egy jótékony hatású baktérium, hozzájárul a bélflóra egyensúlyának fenntartásához [4]. Tejsavat termel, ezzel csökkentve a bélrendszer pH-ját, gátolva a káros mikroorganizmusok elszaporodását, továbbá elősegíti az emésztést, csökkenti a puffadást. A baktériumot a granuláló folyadékba szuszpendálva végeztem el a kakaópor granulálását, így kapva probiotikus kakaó granulátumokat.

- (1) Hirsch, E.; Pantea, E.; Vass, P.; Domján, J.; Molnár, M.; Suhajda, Á.; Andersen, S. K.; Vigh, T.; Verreck, G.; Marosi, G. J.; Nagy, Z. K. *Food and Bioproducts Processing*, **2021**, 128, 84–94.
- (2) Barišić, V.; Icyer, N. C.; Akyil, S.; Toker, O. S.; Flanjak, I.; Aćkar, Đ. *Trends in Food Science and Technology*, **2023**, 132, 65–75.
- (3) Vass, P.; Domokos, A.; Pantea, E.; Szilágyi, B.; Molnár, M.; Záhonyi, P.; Nagy, B.; Nagy, Z. K. *Drying Technology* **2023**, 41, 492–502.
- (4) Sanders, M. E.; Klaenhammer, T. R. *American Dairy Science Association*, **2001**, 84, 319–331.

Szelektív szol-gél enzimrögzítési eljárások fejlesztése mágneses nanorészecskékre

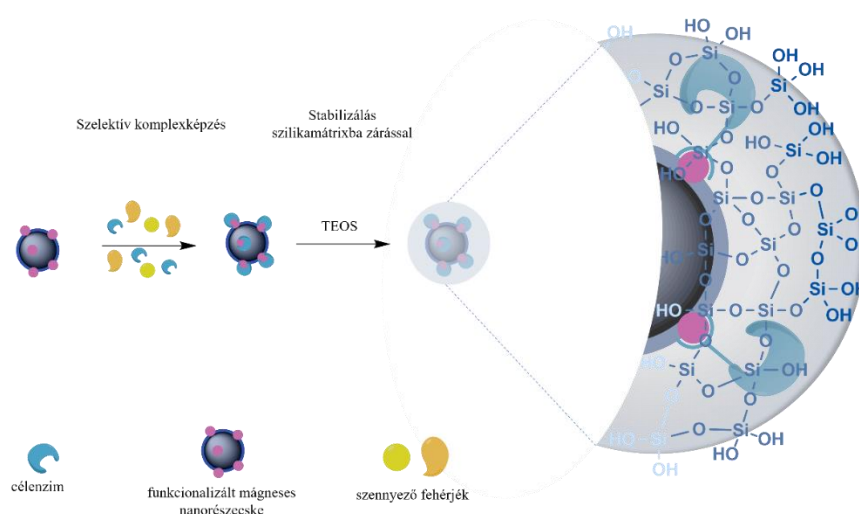
Zrinyi Anna, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Bell Evelin** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Alács Bálint** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

TDK-munkám célja egy olyan eljárás kifejlesztése, mellyel transzamináz enzimek gyors és szelektív rögzítése valósítható meg. Ezt mágneses nanorészecskén (MNP-n) kívántam megvalósítani, aminek felülete szelektivitásért felelős fémionokat tartalmaz. A rögzítési folyamat első felében a hisztidinjelölt transzamináz komplexet képez az átmenetifémionnal, mely etilén-diamin-tetraecetsav-dianhidriddel kapcsolódik az MNP felületéhez. A célenzim tisztítása nem szükséges a komplexképzési folyamathoz, a rögzítés közvetlenül a fermentációs közegből megvalósítható. Ezt követően az MNP és a rögzített enzim köré szol-gél mátrixot alakítottam ki utólagos stabilizálás céljából. Ez azért szükséges, mert az enzim könnyedén kiszorulhat a komplexből a felhasználás során. A mátrix kialakításához optimalizáltam a prekursor komponensek mennyiségét és arányát. Így a térháló szerkezete lehetőséget ad arra, hogy a szubsztrát és a termék könnyen átjusson rajta, viszont az enzim ne szivároгjon.

A rögzítési folyamatot *Vibrio fluvialis* (S)-szelektív transzamináz enzimmal végeztem el. Az elkészült biokatalizátorokat α -metilbenzilamin átalakításában vizsgáltam, amelyből keletkező acetofenon spektrofotométerrel UV-ban jól detektálható. A reakcióban szol-gél mátrixba zárt és utólagos stabilizálás nélküli katalizátorok aktivitását is vizsgáltam.



1. ábra: A tervezett enzimrögzítési módszer összefoglaló ábrája

Porkeverékek összetételének és komponensenkénti szemcseméret-eloszlásának vizsgálata valós időben gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Benczúr Máté Gergő, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Galata Dorián László** tudományos munkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Ficzere Máté** PhD-hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszeripar által előállított készítmények jelentős hányada szilárd formában kerül forgalmazásra. Ezeknek a termékeknek gyakran egy porkeverék az alapja, éppen ezért a porkeverékek gyártása, a porhomogenizálás kulcsfontosságú lépés a gyógyszergyártásban. Az általánosan alkalmazott szakaszos módszerek mellett ígéretes alternatíva lehet a folyamatos technológiák alkalmazása.

A folyamatos porhomogenizálás egy gazdaságosabb, termelékenyebb és sokszor könnyebben szabályozható módszer a porkeverékek gyártására. Az így készített porkeverékek hagyományos, mintázáson alapuló minőségellenőrzése azonban nem szolgáltat megfelelően gyorsan, pontos információt. Így akár nem megfelelő minőségű porkeverék is kerülhet a további formulálási lépésekbe, ami által a forgalmazásra kerülő végtermék minősége is romolhat.

Munkám célja egy olyan mérési módszer fejlesztése és tesztelése volt, amellyel a porkeverékek egy folyamatos gyártás során valós időben vizsgálhatók. A cél a porkeverékek komponenseinek szemcseméret-eloszlása, illetve a keverék összetételének mérése volt. Hipotézisem az volt, hogy egy képelemzésen és gépi látáson alapuló, neurális hálót alkalmazó módszer képes lehet a porkeverék szemcséinek felismerésére és szegmentálására (a részecskék pontos körvonalának meghatározására), ezáltal az egyes részecskék méretbeli tulajdonságainak alapján a méreteloszlás és az összetétel meghatározható. A keverékekről futószalagon haladás közben felvételeket készítettem, a szemcsék felismeréséhez YOLOv5 neurális hálót alkalmaztam. Az összetételmérés vizsgálatához a mérésre történt elsőfokú polinom illesztésének pontosságát elemeztem, a szemcseméret-eloszlás mérés eredményét fénymikroszkóppal felvett képeken, kézzel bejelölt szemcsékből kapott eredményekkel hasonlítottam össze.

Az így kialakított módszerrel lehetőség adódik porkeverékek gyors, in-line vizsgálatára. Ez elsősorban folyamatos porhomogenizálás termékének vizsgálatára alkalmas, lehetőséget biztosít azonban akár tablettákba, kapszulákba kerülő porkeverék minőségének ellenőrzésére valós időben. A módszer további előnye, hogy nem destruktív, illetve a beruházási költsége is jelentősen alacsonyabb a hasonló mérésekre képes berendezésekénél (pl. lézerdiffrakció).

Biszfoszfónát-származékok szintézise α -halogeno- vagy metánszulfoniloxi-benzilfoszfónátokból

Bednárík Janka, IV. évf. (BSc)

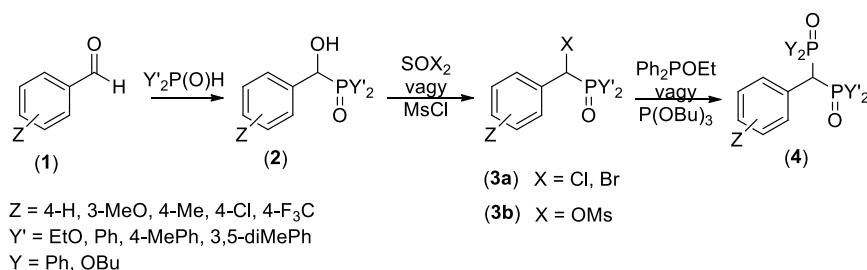
Témavezető: Dr. Keglevich György egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Kémia Tanszék

Konzulens: Szalai Zsuzsanna PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A biszfoszfónátoknak olyan biológiailag aktív anyagok, amelyek hatásosak az osteoporosis, másnéven a csonttrikulás gyógyításában¹. Emiatt fontos feladat a minél gazdaságosabb, zöldebb szintézisút kidolgozása.

Munkám során új biszfoszfónátokat, biszfoszfín-oxidokat és foszfónát-foszfín-oxidokat szintetizáltunk. Kiindulási anyagként szubsztituált benzaldehideket (1) vettünk, amelyekből Pudovik-reakcióban dietilfoszfít vagy diarilfoszfín-oxidok segítségével α -hidroxi-benzilfoszfónátok (2) keletkeztek. A termékekből (2) α -halogeno-benzilfoszfónátokat (3a) képeztünk, amelyhez tionil-kloridot, illetve tionil-bromidot használtunk. Azonban az α -halogeno-benzilfoszfónátok (3a) az Arbuzov-reakció során nem bizonyultak kellően hatékonyak, a biszfoszfónátokat (4) csak alacsony konverzióval kaptuk és jelentős mértékű volt a kiindulási anyag dehalogéneződése.

Ezért azt terveztük, hogy metánszulfoniloxi-származékokat (3b) képezzük², és azokat próbáljuk Arbuzov-reakcióba vinni. A mezil-foszfónátok (3b) szintéziséhez az α -hidroxi-foszfónátokat (2) mezil-kloriddal reagáltattuk. Ezután az α -metánszulfoniloxi-benzilfoszfónátokból (3b) Michaelis-Arbuzov reakcióban kíséreltük meg előállítani a biszfoszfónátokat és a különböző származékokat (4). Az átalakítást oldószer és katalizátor nélkül valósítottuk meg, ami gazdasági és környezetvédelmi szempontból is előnyös.



A nyerstelemeket oszlopkromatográfiásan tisztítottuk. A vegyületeket ³¹P-, ¹³C-, ¹H-NMR, valamint tömegspektroszkópiás módszerekkel jellemeztük. Néhány esetben egykristály röntgendiffrakciós analízist is végeztünk. A fent leírt módszer alkalmazásával új mezilátokat és biszfoszfónát származékokat állítottam elő, összesen 14 új származékot. Az új vegyületek biológiai aktivitásának vizsgálatát is elvégeztük. Az *in vitro* antiproliferatív hatás méréseket PANC-1 pancreas daganat és U266 myeloma tumoros sejtvonalakon végeztük. PANC-1 sejtvonalon, CF₃-szubsztituenst tartalmazó biszfoszfónát, míg U266 sejtvonalon a benzolgyűrűn para helyzetben Cl-atomot tartalmazó foszfónát-foszfín-oxid származék bizonyult a leghatékonyabbnak. Ez a két vegyület rendre 31%, illetve 56%-ra csökkentette a sejtek életképességét.

¹Russel, R. G. G. Bisphosphonates: The first 40 years. *Bone* **2011**, *49*, 2-19.

²Szalai, Z.; Debrei, M.; Ábrányi-Balogh, P.; Bösze, S.; Oláhné Szabó, R.; Karaghiosoff, K.; Drahos, L.; Keglevich, G. *ACS Omega* **2024**, *9*, 28, 31043-31055

(1,2,3-Triazol-4-il)metil-foszforamidát-származékok előállítása azid-alkin-cikloaddícióval

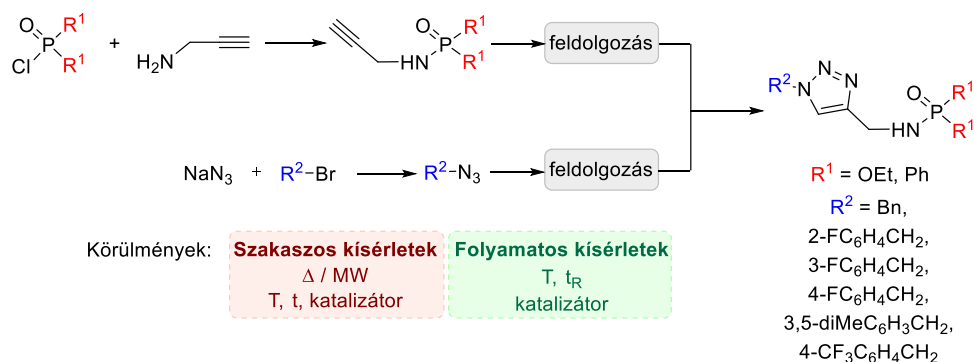
Gerő Viktória III. évf. (BSc)

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

Konzulens: Szabó Kármén Emőke PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A nitrogéntartalmú heterociklusok fontos képviselői közé tartoznak az 1,2,3-triazolszármazékok, széleskörű alkalmazhatóságuk és potenciális biológiai aktivitásuk révén. Kutatómunkám során célul tűztük ki foszforamidát szerkezeti egységet tartalmazó 1,2,3-triazol vegyületek réz(I)-katalizált Huisgen-cikloaddícióval történő előállításának tanulmányozását szakaszos és áramlásos kémiai rendszerekben. Először a kulcsintermedierek, a dietil-(prop-2-inil-foszforamidát) és a benzil-azid szakaszos előállítását tanulmányoztuk a propargil-amin és dietil-klórfoszfát, illetve a nátrium-azid és benzil-bromid modellreakcióin keresztül, majd a két vegyületet azid-alkin-cikloaddícióval kapcsoltuk. Mind a köztitermékek, mind pedig a célvegyület előállítását a fűtési mód, a katalizátor, a hőmérséklet és reakcióidő változtatásával optimalizáltuk. Ezt követően a köztitermékek és a céltermék szintézisét áramlásos kémiai reaktorban is megvalósítottuk, mely során a hőmérséklet és tartózkodási idő hatását vizsgáltuk. A reakciókat gázkromatográfiás (GC) és folyadékkromatográfiás (HPLC) mérésekkel követtük. A termékek szerkezetét ^{31}P -, ^{13}C - és ^1H -NMR-spektroszkópiával, valamint nagyfelbontású tömegspektrometriás (HRMS) vizsgálatokkal jellemeztük.

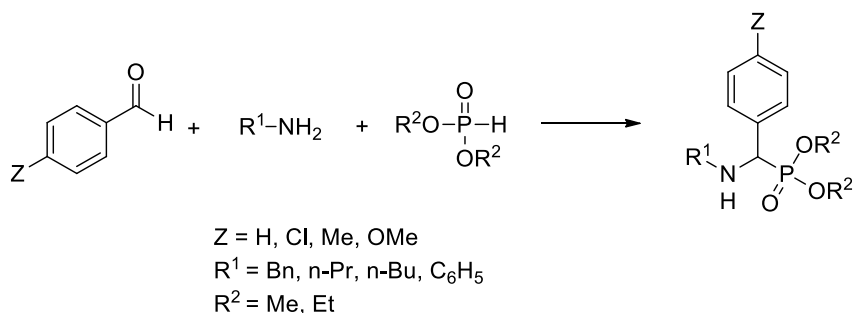
Az optimális paramétereket alkalmazva, célunk volt a reakciók kiterjesztése további prop-2-inil-foszforamid-származékok és szerves azidok előállítására, majd klikk-reakción keresztül (1,2,3-triazol-4-il)metil-foszforamidátok szintézise. Együttműködés keretein belül tervezzük vizsgálni az előállított új származékok antibakteriális hatását és *in vitro* citotoxicitását.



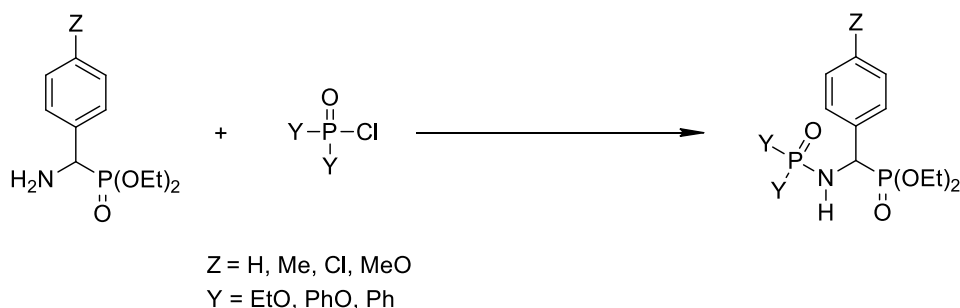
α -Aminofoszfónatok előállítása és módosítása foszforilezéssel**Bircher Márton Áron, II. évf. (MSc)**

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

Kutatócsoportunk évek óta kutatja a kémiai reakciók környezetbarátabbá tételét, azon belül is a foszforvegyületek zöldkémiai előállítását, illetve továbbalakítását. Ilyen reakciótípus például a Kabachnik–Fields-reakció, amivel aminok, aldehidek és foszfitok reakciójából lehet aminofoszfónatokat előállítani. Munkám témája α -aminofoszfónatok szintézise és a vegyületek továbbalakítása foszforilezésen keresztül. A Kabachnik–Fields-reakciót sokszor a környezetre ártalmatlan katalizátorral, illetve oldószerrel végzik. Kutatómunkám során mikrohullámú besugárzással, katalizátor és oldószer nélkül végeztem el a reakciót. Az aminofoszfónatok foszforilezését én vizsgáltam először alaposabban. Foszforilezőszerként dietil-foszforil-kloridot, difenil-foszforil-kloridot, illetve difenil-foszfinil-kloridot alkalmaztunk. Az előállított vegyületeket teljeskörű analitikával jellemeztük, illetve vizsgáltuk bioaktivitásukat is, mivel az α -aminofoszfónatok jelentősége biológiai aktivitásukban rejlik.



1. ábra: α -Aminofoszfónatok előállítása Kabachnik–Fields-reakcióval.



2. ábra: α -Aminofoszfónatok foszforilezési reakciói.

Ciklodextrinhez rögzített szénhidrátalapú koronaéterek szintézise

Cseh Orsolya, II. évf. (MSc)

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

Konzulens: **Varga Bertalan** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Célom olyan szénhidrátalapú monoaza-15-korona-5 koronaéterek előállítása volt, amelyek propargilcsoportot tartalmaznak, és ennek köszönhetően a molekula ciklodextrinhez rögzíthető. A ciklodextrinhez való rögzítés azt a célt szolgálja, hogy felhasználás után a koronaéter visszanyerhető legyen. A ciklodextrinhez rögzített makrociklusok esetén megváltozik a szerves oldószerekben való oldhatóság, ezáltal a felhasználást követően kicsapással vagy szelektív extrakcióval elválaszthatók lesznek a többi komponenstől. Mivel a ciklodextrinnek maguk is királis vegyületek, ezért kihatással vannak az enantioszelektivitásra is. A szintetizált, ciklodextrinnel konjugált koronaéterek katalitikus tulajdonságait olyan modellreakciókban vizsgáltam, amelyeket a kutatócsoportban korábban már jó enantioszelektivitással valósítottak meg.

Organo-fotokatalitikus rendszerek alkalmazása C-alkilezési reakciók fejlesztésére

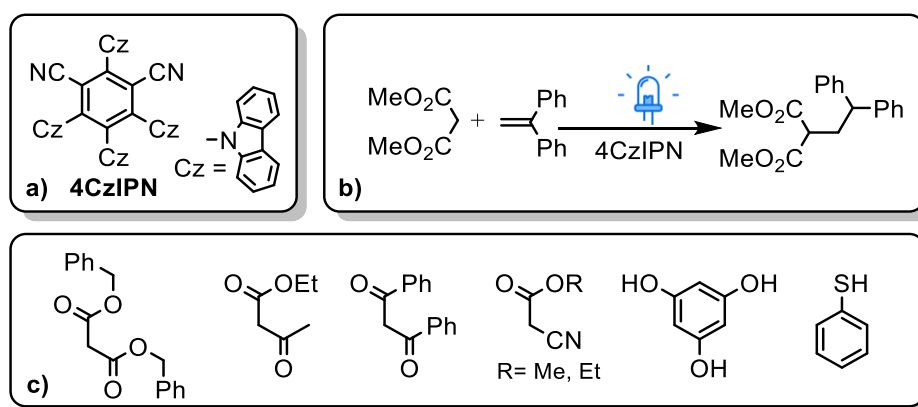
Gémes Gergő, I. évf. (MSc)

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

Konzulens: **Richter Dóra** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A fotokatalízis napjainkban reneszánszát éli, mivel remek eszköze a környezetbarát kémiai átalakításoknak. A legnagyobb előnye, hogy alkalmazásával kifejezetten enyhe körülmények közt végezhetünk reakciókat. Ez hasznos lehet a fejlett gyógyszer intermedierek funkcionálizálása esetén, ahol különösen fontos a szelektivitás.

A fotokatalízisben elengedhetetlen egy robusztus kísérleti elrendezés az ismételhető és reprodukálható eredményekhez. Ebből a célból megvalósítottam egy nyílt forráskódú, 3D-nyomatott fotoreaktor tervet, amely biztosítja a szükséges feltételeket. A reaktor pontosan beállítható fényintenzitással rendelkezik, lehetőséget ad párhuzamos reakciók kivitelezésére, illetve képes a reakcióelegyek termosztálására. Munkám során előállítottam egy nagy lehetőségekkel rendelkező, fémionmentes fotokatalizátort is, a 4CzIPN-t. (1. ábra, a) A katalizátort alkalmaztam egy irodalomban ismert C–C kapcsolási reakcióban, (1. ábra, b) illetve megkíséréltem a reakció kiterjesztését további szubsztrátokra. Eddig hét új szubsztrátummal értem el sikeres reakciót. (1. ábra, c) A továbbiakban az új reakciók optimalizálását tervezem a 3D-nyomatott reaktorban, kísérlettervezés segítségével.



2. ábra a) A 4CzIPN szerkezete, b) A 4CzIPN által katalizált C-alkilezési reakció c) További szubsztrátumok.

α -Hidroxi-benzilfoszfonátok reakciója dialkil-acetiléndikarboxiláttal

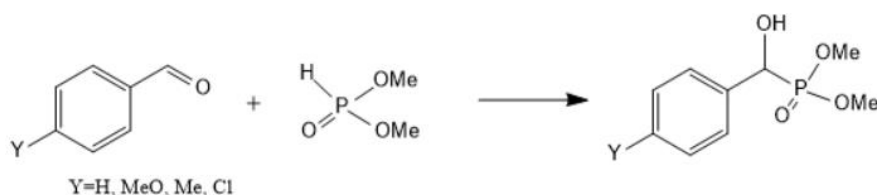
Bese Cintia I. évf. (MSc)

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

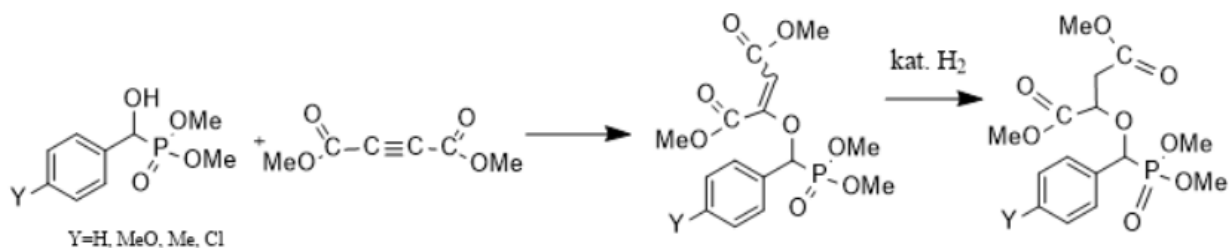
Konzulens: **Dr. Milen Mátyás** vezető kutató
EGIS Gyógyszergyár Zrt.

Az α -hidroxifoszfonátok jelentőségét bioaktivitásuk szempontjából már számos területen felfedezték, így ismertek baktérium-, vírus-, gomba-, és rovarölő tulajdonságai, de beszámoltak már antioxidáns és citotoxikus hatásairól is. Mindezen tulajdonságok enzim-inhibíciós képességével függnek össze. Kutatómunkám során különbözően szubsztituált α -hidroxi-benzilfoszfonátokat állítottam elő, melyeket azután addíciós reakcióba vittem.

Napjainkban egyre nagyobb hangsúlyt kap a környezetbarát megközelítés, így ez megjelenik a kémia területén is. Kutatócsoportunk, - nevéből kifolyólag is -, folyamatosan törekszik a különböző szintézisek minél zöldebb megvalósítására. Az α -hidroxifoszfonátok előállítására a csoportunk már korábban kidolgozott egy új, környezetbarát módszert, melynek során minimális acetonban, trietil-amin katalizátor jelenlétében reagáltatunk szubsztituált benzaldehid származékokat dialkil-foszfittal. A forralás utáni lehűtésre a termék kristályos formában kiválik.



Munkám során a fenti α -hidroxi-benzilfoszfonátokat reagáltattam dimetil- és dietil-acetiléndikarboxiláttal (DMAD, DEAD) DABCO katalizátor jelenlétében. A kapott termékeket kromatográfiásan tisztítottam, és a termékeket különböző analitikai vizsgálatok (^{31}P -, ^{13}C - és ^1H -NMR, 2D-NMR és LC-MS) segítségével vizsgáltam és elemeztem. A keletkezett termék (*E/Z*)-izomer keverék volt, melyek pontos arányát 2D-NMR segítségével határoztuk meg. A termékeket katalitikusan hidrogéneztek, amikor is diasztereomer-elegyeket kaptunk.



A kapott adduktokat bioaktivitási vizsgálatra küldtük, melyek eredményeire még várunk. Munkám folytatásaként α -aminofoszfonát vegyületekkel szeretnénk hasonló reakciókat elvégezni.

Monobenzo-pentalén kromofórok szerkezeti hangolása fotovoltaiikus alkalmazásokhoz

Jakab Máté, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. London Gábor** tudományos főmunkatárs, csoportvezető
HUN-REN TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport
Meiszer Enikő PhD-hallgató
HUN-REN TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék

A szinglet exciton bomlás egy, még ma is kevés irodalmi háttérrel rendelkező, „töltésszorzó” folyamat, mely napelemek hatékonyságnövelését teheti lehetővé. Ennek során egy szinglet gerjesztett állapotú elektron (S_1) átalakul két alacsonyabb energiájú triplet gerjesztett állapotú (T_1) elektron keletkezik. A szinglet bomlásra alkalmas molekulák esetén, azok gerjesztett állapotbeli energiaszintjei [$E(S_1)$, $E(T_1)$] között, fenn kell állnia az $E(S_1) \geq 2E(T_1)$ relációnak. Az egyik antiaromás rendszer, amely alkalmas lehet a jelenség produkálására, kvantumkémiai számítások alapján, a monobenzo-pentalén szerkezet. A kutatás során a monobenzo-pentalén alapvázat különböző többgyűrűs aromás és heteroaromás rendszerekkel szubsztituáljuk. Az új monobenzo-pentalének szintéziséen túl, a különböző szubsztituensek által kiváltott elektronikai változásokat UV–Vis- és $^1\text{H-NMR}$ -spektroszkópiával térképezzük fel. Továbbá UV–Vis-spektrofotométer segítségével, hőmérséklet és különböző hullámhosszúságú fényvel való besugárzás mellett, a különbözőképpen szubsztituált származékok stabilitását is vizsgáljuk. Az $^1\text{H-NMR}$ - és az UV–Vis-spektrumok összehasonlító elemzése alapján látszik, hogy a monobenzo-pentalén-vázhoz kapcsolt különböző aromás és heteroaromás szubsztituensek nem változtatják meg jelentősen a váz elektronikus szerkezetét, így alkalmasak lehetnek a szinglet exciton bomlás produkálására. A stabilitási mérésekből pedig kiderült, hogy a monobenzo-pentalének szubsztituáltsági foka, illetve a szubsztituensek szerkezete befolyásolja ezen molekulák stabilitását. A kapott eredmények biztatóak a monobenzo-pentalén-származékok szinglet exciton bomláson alapuló fotovoltaiikus rendszerekben való alkalmazására.

Aktiválható, makrociklusos tetrazinok szintézise

Unyi Zsombor, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Cserép Balázs Gergely** tudományos munkatárs
HUN-REN TTK SZKI Kémiai Biológia Kutatócsoport

Konzulens: **Dr. Kele Péter** tudományos főmunkatárs
HUN-REN TTK SZKI Kémiai Biológia Kutatócsoport

Kutatómunkám során tetrazinalapú makrociklusokat állítottam elő, melyek kezdetben nem vihetők IEDDA-reakcióba *transz*-ciklookténnel. Egy specifikus külső (fény) vagy belső (enzim) hatásra a makrociklus felnyílik, aktiválódik és így újra gyors reakcióba tud lépni *transz*-ciklookténnel. Az IEDDA-reakció ilyen módon történő gátlása azért előnyös, mert az ún. click-to-release *transz*-ciklookténhez kötött molekula (például egy gyógyszer) csak a tetrazinnal való reakció után hasad le, így a külső vagy belső hatás tudja biztosítani a kívánt molekula időben és térben célzott felszabadulását.

Egy bisz(akridino)koronaéter a spermin bioszintézis oligoaminjainak felismerésére

Kisfaludi Péter, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Tóth Tünde** habil. egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Golcs Ádám posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Huszthy Péter** Professor Emeritus, az MTA rendes tagja

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az oligoaminok a sejtek anyagcseréjében rendkívül sokféle biológiai funkciót látnak el (pl. a Ca^{2+} -beáramlás, neuronális nitrogén-monoxid-szintáz, membránpotenciál és Na^+ -, K^+ -ATPáz-aktivitás szabályozása a szinaptoszómákban, stb.). Emellett élettartam-növelő anyagokként is működnek, valamint meghatározó szerepet játszanak az autofágiában, a sejtnövekedésben, a proliferációban és a sejthalálban, míg szabályozási folyamataik kulcsfontosságúak számos rákos megbetegedés esetében. Ennek ellenéreműködési mechanizmusuk megértése még csak most kezdődött el. A bioszenzoros módszerek mellett csak néhány egyszerű, kismolekulás teszt áll rendelkezésre az oligoaminok szelektív, de reverzibilis nyomon követésére vagy fluoreszcens jelölésére. Ezen megfontolások alapján állítottunk elő egy új bisz(akridino)koronaétert, mint biogén oligoaminok vizsgálatára alkalmazható szenzormolekulát. A szenzormolekula szelektíven képes megkülönböztetni az oligoaminokat az alifás mono- és diamin analogonoktól, miközben reverzibilis 1:2 sztöchiometriájú (gazdamolekula-oligoamin) komplexképződést mutat, melyet fluoreszcencia-intenzitásnövekedés kísér. A szenzormolekula oligoamin-felismerő tulajdonságainak vizsgálata céljából számítógépes szimuláción alapuló molekuláris dokkolást és titrálási kísérleteken alapuló regressziós módszereket alkalmaztunk. Az új fluoreszcens szenzormolekula releváns potenciált hordoz az oligoaminrendszerek molekuláris szintű vizsgálata terén (sejtfelvétel, transzport, rákos folyamatok előrehaladása stb.), így számos alkalmazás kidolgozásához járulhat hozzá a későbbiekben.

Potenciális gyógyszer-intermedierek aszimmetrikus szintézise prokirális ketonokból enzimátikus módon

Mócza Levente András, IV. évf. (BSc)

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

Konzulens: **Honvári Máté Gergő** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszeripar és a gyógyszertervezés rohamos fejlődése folytán egyre bonyolultabb szerkezetű hatóanyagok jelennek meg a piacon. Ezeknek a hatóanyagoknak a szintézise is összetettebb, így felmerül az igény új reakcióutak felfedezésére, amelyekkel minél nagyobb konverzióval állítható elő a kívánt struktúrájú hatóanyag. Általában egy-egy hatóanyag szintézisét nem egy kiindulási anyagból hajtják végre (lineáris módszer), hanem több ún. fragmens molekulát állítanak elő, majd ezeket összekapcsolva kapják a terméket (konvergens módszer). A kismolekulás gyógyszerhatóanyagok nagy részében nitrogéntartalmú heterociklus található. A leggyakoribb ilyen heterociklusok a piperidin, a piridin és a piperazin. Ezekre a heterociklusokra különböző oldalláncok vihetők be alkilezéssel, amikre aztán további csoportokat aggatva végül megkapjuk a hatóanyagot. A gyógyszerstruktúrák diverzitása miatt több különböző oldalláncot kell a kiindulási anyagokra kapcsolni, azonban megoldható, hogy egy adott oldallánc bevitelével többféle származék is kialakítható legyen. Ennek eredményeként különböző funkciós csoportok keletkezhetnek. Egy jó példa erre az oxocsoport. Egyrészt bizonyos élesztőtörzsekben kimutatták, hogy rendelkeznek ún. ketoreduktáz aktivitással. Ez azt jelenti, hogy az oxocsoportot hidroxilcsoporttá redukálják, még hozzá sztereoselektíven. Másrészt transzamináz enzimekkel az oxocsoportot aminocsoporttá is lehet alakítani. Kutatómunkám célja volt néhány kiválasztott nitrogéntartalmú heterociklusra oxocsoportot tartalmazó alkiláncot kapcsolni klóracetonnal, majd a keletkezett prokirális ketonok aszimmetrikus átalakítása a megfelelő alkoholokká ketoreduktáz aktivitású biokatalizátorok segítségével. Kutatómunkámmal a fragmensalapú gyógyszerkutatás heterociklusos intermedierekről létrehozott tudástárát kívánom bővíteni.

Fotoaktiválható idegnövekedési faktor mimetikumok szintézise és fotokémiai vizsgálata

Szabó Bence, IV. évf. (BSc.)

Témavezetők: **Dr. Cseri Levente** szenior vegyész
BrainVisionCenter Nonprofit Kft.
Dr. Kupai József habil. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A központi idegrendszeret érintő sérülések, betegségek világszerte több millió embert érintenek. Kutatócsoportunk célja, hogy ezen kondíciók kezelésére alkalmas fénystimuláción alapuló terápiás eljárásokat dolgozzunk ki. Szervezetünkben az idegsejtek fejlődése, túlélése szempontjából számos vegyület játszik meghatározó szerepet, ezek közül az egyik legfontosab az idegnövekedési faktor (NGF) fehérje. Kutatási munkám során céloim olyan kismolekulás vegyületek előállítása volt, melyekről korábban már megmutatták, hogy képesek az NGF-hez hasonló biológiai hatást kifejteni. Ezeken kívül az irodalomban ismert, széles körben használt fotolabilis védőcsoportok szintézisét is megvalósítottam. Végül az NGF mimetikumok és fotolabilis védőcsoportok sikeres szintézisét követően, ezek kapcsolása révén öt új "cagelt" vegyületet állítottam elő. Annak érdekében, hogy a későbbi kísérletek során hatékonyan tudjuk használni az előállított vegyületeket, vizsgáltam azok fotokémiai és spektroszkópai tulajdonságait is. A molekulák fotolízisére jellemző kvantumhatékonyság mérésére egy új eljárást alkalmaztam, mely során a 4,4'-dimetilazobenzolt használtam referencia anyagként, annak fény hatására lejátszódó cisz-transz izomerizációs folyamatait felhasználva. A kapott molekulák segítségével több olyan biológiai kísérletet tervezünk a jövőben megvalósítani, melyek során az aktív vegyületek felszabadulásának tér- és időbeli szabályozását fény segítségével érjük el. Ezen stratégia lehetőséget nyújthat az axonok irányított növesztésére, valamint idegsérülések helyreállítására az élő sejtek károsítása nélkül.