

**XVII. SZENT-GYÖRGYI ALBERT
KONFERENCIA**

KIADVÁNYA

2024. ÁPRILIS 26-27.

Előadások és poszterszekció

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

CH épület

A BME Szent-Györgyi Albert Szakkollégium szervezésében



Tartalom

Köszöntő	3
Rövid program	4
Short programme	5
Részletes program.....	7
Plenáris előadások kivonatai.....	12
Hallgatói előadások kivonatai.....	23
Abstracts of student presentations	39
Poszterszekció kivonatai.....	42
Abstracts of student posters	47
Jegyzetek.....	50

Köszöntő

A BME Szent-Györgyi Albert Szakkollégium (SzASz) 2001-es alakulása óta kiemelkedő fontosságú diákszervezet a Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karon, mára meghatározó részévé vált a Kar szakmai és kulturális életének. Egyik alappillére a 2014-ban megalakult VEGY-ÉRTÉK Tehetségpontnak is, mely kétszer is „akkreditált kiváló tehetségpont” minősítést kapott, nem kis érdemben a SzASz tevékenységének. A Szent-Györgyi Albert Szakkollégium évről-évre változatlan lendülettel folytatja tevékenységét. A Szakkollégium a kar oktatási tevékenységét mintegy kiegészítve a hallgatók szakmai fejlődését segíti részben az egyetem terheit nehezen viselő diákok felzárkóztatásával, valamint érdekes, a hallgatók látókörét szélesítő előadások, üzemlátogatások, egyéb szakmai programok szervezésével. A tartalmas kikapcsolódásra pedig kulturális programjaik szolgálnak.

A Szakkollégium kiemelt rendezvénye a hagyományos „**Szent-Györgyi Albert Konferencia**”, melyen meghívott előadók mutatják be egy-egy tudományterület, vagy iparág jelenét, illetve jövőjét, valamint a legtehetségesebb hallgatók saját kutatási munkáikat is előadhatják.

Az idei évben a Konferencia témája a „**Mesterséges Intelligencia**” lesz. Nem is választhattak volna időszerűbb témát, hiszen például a ChatGPT használata lassan mindennaposá válik a hallgatók körében, komoly fejtörést okozva ezzel az oktatóknak, hogyan is kezeljék ezt az új helyzetet. De természetesen számtalan lehetőséget, kihívást, kérdést és veszélyt is rejt ezen új technológia. Biztos vagyok benne, hogy a konferencia után többet tudunk majd a témáról, de biztosan számos nyitott kérdés is marad még, melyekről a jövőben is jókat lehet majd beszélgetni.

A Konferencia másik fontos célja lehetőséget biztosítani a fiatal generációnak, hogy bemutathassa saját kutatási eredményeit, egyben a résztvevőknek, hogy megismerhessék diáktársaik tevékenységét. A Konferencia arra is jó lehetőség, hogy új együttműködések épüljenek ki, vagy éppen korábbi kapcsolatok kapjanak új energiákat.

Ezekkel a gondolatokkal kívánok mindenkinek sikeres, élvezetes és tartalmas konferenciát!

Dr. Hornyánszky Gábor

*BME-VBK tehetséggondozással kapcsolatos dékánhelyettes
a SzASz tiszteletbeli tagja*



Rövid program

Péntek, április 26.		Szombat, április 27.	
9:15 - 10:15	Regisztráció	9:00 - 10:00	Fogadás, reggeli kávé
10:15 - 10:45	MEGNYITÓ	10:00 - 10:45	Hallgatói előadások
10:45 - 11:30	Hallgatói előadások	10:45 - 11:00	Kávészünet
11:30 - 11:45	Kávészünet	11:00 - 11:45	Plenáris előadás
11:45 - 12:30	Plenáris előadás	11:45 - 12:30	Hallgatói előadások
12:30 - 13:15	Hallgatói előadások	12:30 - 13:30	Ebédészünet
13:15 - 14:15	Ebédészünet	13:30 - 14:15	Plenáris előadás
14:15 - 15:00	Plenáris előadás	14:15 - 14:45	Hallgatói előadások
15:00 - 15:45	Hallgatói előadások	14:45 - 15:00	Kávészünet
15:45 - 16:00	Kávészünet	15:00 - 15:15	ZÁRÁS, eredményhirdetés
16:00 - 16:45	Plenáris előadás	15:15 - 15:30	Búcsú
16:45 - 18:00	Poszterek bemutatása		
18:00 - 19:30	Vacsora		
19:30 - 21:00	Borkóstoló		



Short programme

Friday, 26th of April.		Saturday, 27th of April	
9:15 - 10:15	Registration	9:00 - 10:00	Reception, breakfast coffee
10:15 - 10:45	OPENING	10:00 - 10:45	Student presentations
10:45 - 11:30	Student presentations	10:45 - 11:00	Coffee break
11:30 - 11:45	Coffee break	11:00 - 11:45	Plenary presentation
11:45 - 12:30	Plenary presentation	11:45 - 12:30	Student presentations
12:30 - 13:15	Student presentations	12:30 - 13:30	Lunch break
13:15 - 14:15	Lunch break	13:30 - 14:15	Plenary presentation
14:15 - 15:00	Plenary presentation	14:15 - 14:45	Student presentations
15:00 - 15:45	Student presentations	14:45 - 15:00	Coffee break
15:45 - 16:00	Coffee break	15:00 - 15:15	CLOSING, announcement of results
16:00 - 16:45	Plenary presentation	15:15 - 15:30	Farewell
16:45 - 18:00	Poster presentations		
18:00 - 19:30	Dinner		
19:30 - 21:00	Wine tasting		



TÁMOGATÓINK

Bronz fokozatú támogatók



TotalEnergies



Együttműködő partnereink



Szakkollégium állandó támogatói



KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM



EMBERI ERŐFORRÁS
TÁMOGATÁSKEZELŐ



RÉSZLETES PROGRAM



Péntek, április 26.

- 9:15 - 10:15 REGISZTRÁCIÓ, KÁVÉ
- 10:15 - 10:45 MEGNYITÓ
- 10:45 - 11:00 Németh Áron Soma – Izatinok, primer aminok és β -ketofoszfónátok reakciójának vizsgálata
- 11:00 - 11:15 Lucy Nyambura Karanja – Synthesis and Characterization of ZnO nanorods
- 11:15 - 11:30 David Sebastiao Simao Da Cruz – Techno-economic assessment of cyclodextrin on *Bacillus lincheniformis*
- 11:30 - 11:45 KÁVÉSZÜNET
- 11:45 - 12:30 **Dr. Höfler Lajos** – Gépi tanulási technikák kritikus összehasonlítása kémiai érzékelők adatainak feldolgozásához
- 12:30 - 12:45 Gyöngyössy Ádám – Heteroaromás kapszaicinoidok előállítása áramlásos kémiai rendszerekben
- 12:45 - 13:00 Gémes Gergő – Fotokatalitikus rendszerek fejlesztése és alkalmazása C-alkilezési reakciókban
- 13:00 - 13:15 Szabó Domonkos – Poliaszpartamid alapú szupermakropórusos gélek
- 13:15 - 14:15 EBÉDSZÜNET

- 14:15 - 15:00 **Dr. Koncsos Tamás** – Mesterséges intelligencia alkalmazások a biotechnológiai modellezésben
- 15:00 - 15:15 Nguyen Thuy Hong Ha – A mozgófázis hatásának vizsgálata atropizomer-vegyületek királis módszerfejlesztése során
- 15:15 - 15:30 Halmai Mónika – Sejtostódásgátló hatású, foszfintartalmú vindolin- és krizinszármazékok előállítása
- 15:30 - 15:45 Mócza Levente András – Kemoterápiás szerekkel indukált mutagenézis kimutatása 3D-PCR-rel
- 15:45 - 16:00 KÁVÉSZÜNET
- 16:00 - 16:45 **Dr. Horváth Péter** – Élet a pixelek mögött: daganat és víruskutatás mesterséges intelligenciával
- 16:45 - 18:00 POSZTERSZEKCIÓ
- 18:00 - 19:30 VACSORA
- 19:30 - 21:00 BORKÓSTOLÓ



Szombat, április 27.

- 9:00 - 10:00 FOGADÁS, REGGELI KÁVÉ
- 10:00 - 10:15 Spátay Sára – Mikrotálcák PVDF-szűrőmembránjának kémiai funkcionálizálása
- 10:15 - 10:30 Györfi Sára – Borán katalizátorok sokoldalú szerepe az aldehidek átalakításában
- 10:30 - 10:45 Kiss Dorina – A glikokálix elméleti és kísérleti vizsgálata
- 10:45 - 11:00 KÁVÉSZÜNET
- 11:00 - 11:45 **Szalay Kristóf** – Mit nem mer elmondani a biokémiakönyved, és hogy jön ehhez az MI?
- 11:45 - 12:00 Steinsits Dániel – 3,3-Diszubsztituált oxindolok előállítása és alkalmazhatóságuk vizsgálata
- 12:00 - 12:15 Bartha Lilla – Várhatóan sejtosztódásgátló hatású β -karbolin-vindolin hibridek előállítása
- 12:15 - 12:30 Fekete Dániel – Különböző granulálási technikák vizsgálata és fejlesztése ugyanazon a folyamatos rendszeren
- 12:30 - 13:30 EBÉDSZÜNET
- 13:30 - 14:15 **Dr. Galata Dorián** – Mesterséges intelligencia alkalmazásai automatizált gyógyszeripari minőségellenőrzésben

14:15 - 14:30 Péli Noémi – Natív és funkcionalizált szilícium-dioxid nanorészecskékhez rögzített rekombináns humán tirozin-hidroxiláz átfogó jellemzése

14:30 - 14:45 Kisfaludi Péter – Akridin- és piridin-egységet tartalmazó új koronaéterek előállítás és komplexképzési tulajdonságaik vizsgálata

14:45 - 15:00 KÁVÉSZÜNET

15:00 - 15:15 EREDMÉNYHIRDETÉS

15:15 - 15:30 BÚCSÚ



**PLENÁRIS
ELŐADÁSOK
KIVONATAI**



**ABSTRACTS OF
PLENARY
PRESENTATIONS**



GÉPI TANULÁSI TECHNIKÁK KRITIKUS ÖSSZEHASONLÍTÁSA KÉMIAI ÉRZÉKELŐK ADATAINAK FELDOLGOZÁSÁHOZ

Dr. Höfler Lajos

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport



A kémiai érzékelők területén kritikus jelentősége van annak, hogy az adatfeldolgozásban használt gépi tanulási módszerek ne csak memorizálják a betanításukra használt példákat, hanem képesek legyenek ismeretlen mintákra általánosítani is. Erre azért van szükség, mert csak általánosítással garantálható az ismeretlen minták kémiai tulajdonságainak vagy koncentrációsintjeinek pontos előrejelzése. Különböző gépi tanulási algoritmusok hatékonyságát vizsgáltuk nemlineáris érzékelő-adatok felhasználásával, kiemelve a modell értelmezhetőségének jelentőségét a pontos eredmények biztosításában.

Mivel egyre több kutatócsoport használja ki a gépi tanulási technikák előnyeit analitikai módszereik pontosságának növelése érdekében, fontos hangsúlyozni a neurális hálózatok korlátait a kémiai érzékelési alkalmazásokban, ahol gyakran nem áll rendelkezésre megfelelő számú adat. Ehelyett ilyen esetekben a szimbolikus regressziós modellek használata ajánlott, mivel ezek kisebb adathalmazok esetén is kiváló pontosságot nyújtanak, és a létrehozott matematikai kifejezéseken keresztül értelmezhetőek a modellek.



CRITICAL COMPARISON OF MACHINE LEARNING TECHNIQUES FOR CHEMICAL SENSOR DATA PROCESSING

Dr. Lajos Höfler

Budapest University of Technology and Economics, Department of Inorganic and Analytical Chemistry

MTA-BME Technical Analytical Chemistry Research Group

It is of great importance in chemical sensors that machine learning methods used in data processing not only memorize the examples used to train them but also generalize to unknown samples. This is necessary because only this generalization can guarantee accurate prediction of chemical properties or concentration levels of unknown samples. The effectiveness of various machine learning algorithms using nonlinear sensor data was investigated, highlighting the importance of model interpretability in ensuring accurate results.

As an increasing number of research groups are taking advantage of machine learning techniques to improve the accuracy of their analytical methods, it is important to highlight the limitations of neural networks in chemical sensing applications, where often insufficient data are available. Instead, in such cases, symbolic regression models are recommended, as they provide excellent accuracy even for smaller data sets, and the models can be interpreted through the mathematical expressions generated.



MESTERSÉGES INTELLIGENCIA ALKALMAZÁSOK A BIOTECHNOLÓGIAI MODELLEZÉSBEN

Dr. Koncsos Tamás

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vízi
Közmű és Környezetmérnöki Tanszék



A mesterséges intelligencia alkalmazások általános áttekintése mellett ismertetésre kerülnek a bizonytalanság kezelésére alkalmas lágy számítási módszerek úgy, mint felügyelt és nem felügyelt tanítás, megerősítéses tanulás koncepciója. A biomérnöki szakterületen különleges jelentőséggel bírhat az idegsejtek működési elvén alapuló mesterséges neuronhálózatok alkalmazása, amely adathalmaz alapján osztályozásra és mintázatfelismerésre képesek: pl. biotechnológiai fejlesztéseknél, gyógyszerhatékonyság, szinergiák klaszterezésénél kapnak fontos szerepet. Következő lépésben a megerősítéses tanulás (reinforcement learning) témakörét tárjuk fel, amely virtuális ágensek jutalom alapú evolúcióján alapul: ebben az esetben nincs tanító, a rendszer a környezetéből kapott visszacsatolások alapján építi fel a tudásbázisát. Bemutatásra kerül, hogy a Monopoly, Sakk, robotporszívók, önzetű járművek mesterséges intelligencia modelljei miként kapcsolódnak a biomérnöki és környezetmérnöki területhez, különös tekintettel a NEAT, DeepQ learning, Markov folyamatokra. Bemutatása történik egy sajátfejlesztésű döntéstámogatórendszernek, amely eleveniszapos szennyvíztisztító telepek biokinetikai modellezése mellett a levegőztetés, iszaprecirkuláció optimalizációját teszi lehetővé az üzemeltetési költségek figyelembevétele mellett. Az előadás tematikáját képezi a képfelismerésnél és képgenerálásnál használt módszerek, alkalmazásukkal kapcsolatos tapasztalok bemutatása: konvolúciós neurális hálók, önszervező térképek.



ARTIFICIAL INTELLIGENCE APPLICATIONS IN BIOTECHNOLOGICAL MODELING

Dr. Tamás Koncsos

Budapest University of Technology and Economics, Department of Sanitary and Environmental Engineering

Besides a general overview of artificial intelligence applications, the presentation aims to cover the soft computing methods suitable for managing uncertainty, such as supervised and unsupervised learning, along with the concept of reinforcement learning. The use of artificial neural networks, based on the operational principles of neurons, may hold special importance in the bioengineering field. They are capable of classification and pattern recognition based on data sets, for example, playing a crucial role in biotechnological developments, clustering of pharmaceutical drug efficiency, synergies. The next section covers the subject of reinforcement learning, which relies on the reward-based evolution of virtual agents: in this model, no underlying dataset is available, the system builds up knowledge without existing instructor or input-output samples, but feedback from the environment. It will be demonstrated how the artificial intelligence models applied in games and applications like Monopoly, Chess, robotic vacuums and autonomous vehicles may be applied in the bioengineering, environmental engineering fields, with special focus on NEAT, DeepQ learning, and Markov processes. A decision-support system is presented, which enables the optimization of aeration and sludge recirculation in activated sludge type wastewater treatment plants, in addition to biokinetic modeling, while taking operational costs into account. The presentation covers the methods used in image recognition and generation, along with experiences related to the use of convolutional neural networks, self-organizing maps.



ÉLET A PIXELEK MÖGÖTT: DAGANAT ÉS VÍRUSKUTATÁS MESTERSÉGES INTELLIGENCIÁVAL

Dr. Horváth Péter

Szegedi Biológiai Kutatóközpont, Biokémiai Intézet,
Szintetikus és Rendszerbiológiai Egység

Institute for Molecular Medicine Finland, HiLIFE, University
of Helsinki, Finnország

Helmholtz Munich, AI4Health Institute, Németország



Előadásomban áttekintést adok a nagyléptékű fénymikroszkópos kísérletek egysejt szintű feldolgozásának számítástechnikai lépéseiről. Először egy új mikroszkópos képkorrekciós eljárást mutatok be, mely kijavítja a nem egyenletes megvilágításból származó képi hibákat, így támogatva a fényintenzitás alapú mérések helyességét. Ezután új, differenciál geometriára, energia-minimalizációs módszerekre és mesterséges intelligenciára alapuló egysejt szegmentálási módszereket ismertetek. Bemutatom az Advanced Cell Classifier (ACC) gépi tanulási szoftvert, melyet azért fejlesztettünk, hogy a képi jellemzőkből származó információ felhasználásával sejtes fenotípusokat azonosítsunk. Az ACC egy olyan interaktív felületet biztosít, mely segítségével a felhasználók hatékonyan képesek intelligens algoritmusokat sejtek automatikus fenotipizálására tanítani. Azon esetekre, ahol nem lehetséges diszkrét fenotípus kategóriák létrehozása, bemutattunk egy multi-parametrikus regresszió alapuló, eljárást, mely képes biológiai folyamatok elemzésére. A tanulási gyorsaság és a pontosság növelése érdekében egy olyan aktív tanulási sémát dolgoztunk ki, amely kiválasztja a legtöbb információval rendelkező sejtmintákat.

A fejlesztett módszerek kombinációit felhasználva különböző egysejt kinyerési stratégiákat mutattunk be. Ismertetem a frissen elért sikeres eredményeinket egysejt DNS és RNS szekvenálás, proteomikai, lipidomikai és célzott elektro-fiziológiai elemzések területén.



LIFE BEYOND THE PIXELS: DEEP LEARNING METHODS IN CANCER AND VIRUS RESEARCH

Dr. Péter Horváth

Institute of Biochemistry, Biological Research Centre, Szeged, Hungary

Institute for Molecular Medicine Finland, HiLIFE, University of Helsinki, Finland

Helmholtz Munich, AI4Health Institute, Germany

In this talk I will give an overview of the computational steps in the analysis of a single cell-based large-scale microscopy experiments. First, I will present a novel microscopic image correction method designed to eliminate illumination and uneven background effects which, left uncorrected, corrupt intensity-based measurements. New single-cell image segmentation methods will be presented using differential geometry, energy minimization and deep learning methods. I will discuss the Advanced Cell Classifier (ACC), a machine learning software tool capable of identifying cellular phenotypes based on features extracted from the image. It provides an interface for a user to efficiently train machine learning methods to predict various phenotypes. For cases where discrete cell-based decisions are not suitable, we propose a method to use multi-parametric regression to analyze continuous biological phenomena. To improve the learning speed and accuracy, we propose an active learning scheme that selects the most informative cell samples.

Our recently developed single-cell isolation methods, based on laser-microcapturing and patch clamping, utilize the selection and extraction of specific cell(s) using the above machine learning models. I will show that we successfully performed DNA and RNA sequencing, proteomics, lipidomics and targeted electrophysiology measurements on the selected cells.



MIT NEM MER ELMONDANI A BIOKÉMIAKÖNYVED, ÉS HOGY JÖN EHHEZ AZ MI?

Szalay Kristóf

Turbine AI

Közhely, hogy a gyógyszerkutatás hosszú, bonyolult és drága folyamat. Bár a terület rengeteget fejlődött az elmúlt száz évben, még mindig sokszor csak a folyamat végén derül ki, hogy a gyógyszer valójában nem is alkalmas arra, amire készítették. Egyre újabb és újabb módszerekkel egyre több adatot tudunk meg az emberi sejtek belső működéséről, és ezek sok esetben nagyon más képet festenek a biológiáról, mint amit a tankönyvekben látunk. Ennek a megértésében tudhat majd nekünk segíteni a mesterséges intelligencia, de önmagában nem lesz elég. A gyógyszerkutatás kémiai oldalán már vannak bevált modellezési és MI eszközök, ebben az előadásban a biológiai oldal fejlődéséről és lehetőségeiről fogok mesélni.





WHAT DOES YOUR BIOCHEMISTRY BOOK DARE NOT TELL YOU AND HOW DOES AI COME TO IT?

Kristóf Szalay

Turbine AI

It is a cliché that drug research is a long, complicated and expensive process. Although the field has come a long way in the last hundred years, it is still often only at the end of the process that it is discovered that the medicine is not actually fit for purpose. We are learning more and more about the inner workings of human cells using newer and newer methods, and in many cases, these give us a very different picture of biology from what we see in books. Artificial intelligence can help us understand this, but it will not be enough on its own. There are already proven modelling and AI tools on the chemistry side of drug discovery, in this talk I will talk about the development and potential of the biological side.



MESTERSÉGES INTELLIGENCIA ALKALMAZÁSAI AUTOMATIZÁLT GYÓGYSZERIPARI MINŐSÉGELLENŐRZÉSBN

Dr. Galata Dorián

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Gyógyszer-, Környezeti- és Biztonságtechnológiai Anyagok
Kutatócsoport



A társadalom gyógyszeripar felé támasztott egyik legfontosabb elvárása, hogy a betegek számára mindig kifogástalan minőségű készítmények álljanak rendelkezésre.

Jelenleg a gyógyszeripari gyártásban a minőséget kis számú mintavételen alapuló, lassú és roncsolásos analitikai eljárásokkal ellenőrzik. Ezek nem teszik lehetővé a folyamatok valós időben történő követését és a fellépő zavarások után a gyors beavatkozást. A mesterséges intelligencia fejlődésével azonban már rendelkezésre állnak olyan algoritmusok, amik fel tudják dolgozni valós időben működő szenzorok, például kamerák adatait. Az ilyen megoldásoknak köszönhetően a jövőben a gyártóknak és a pácienseknek sem kell majd aggódni amiatt, hogy rossz minőségű termék keletkezik, mivel a gyártósor automatikusan felismeri majd ezeket és beavatkozik, megszüntetve a probléma forrását.



APPLICATIONS OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN THE AUTOMATIC QUALITY INSPECTION OF PHARMACEUTICAL MANUFACTURING

Dr. Dorián Galata

**Budapest University of Technology and Economics,
Technology of Pharmaceutical, Environmental and Safety Materials Research Group**

One of society's most important expectations towards the pharmaceutical industry is that products of flawless quality are always available to patients. Currently, in pharmaceutical production, quality is controlled by slow and destructive analytical procedures based on a small number of samples. These do not allow for real-time monitoring of processes and quick intervention after disturbances. However, with the development of artificial intelligence, algorithms are already available that can process data from sensors operating in real time, such as cameras. Thanks to such solutions, in the future, manufacturers and patients will not have to worry about poor quality products, as the production line will automatically recognize them and intervene, eliminating the source of the problem.



HALLGATÓI ELŐADÁSOK KIVONATAI

IZATINOK, PRIMER AMINOK ÉS β -KETOFOSZFONÁTOK REAKCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA

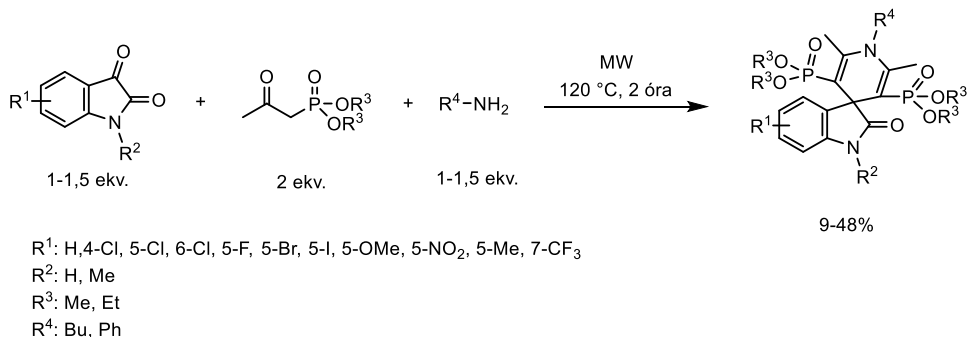
Németh Áron Soma, Rávai Bettina, Bálint Erika

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

Az *N*-heterociklusok egyik fontos képviselője az izatin, mely számos molekula, köztük a természetben és a gyógyszeriparban is fontos spirooxindol-származékok építőköve [1]. A spirooxindol-dihidropiridinek két fontos farmakofór szerkezeti egységből tevődnek össze, melyek számos biológiailag aktív molekulában megtalálhatók és a gyógyászatban is nagy jelentőséggel bírnak [2-3].

A kutatómunka során spirooxindol-dihidropiridin-biszfoszfónátok előállítását tanulmányoztuk különböző izatinok, primer aminok és β -ketofoszfónátok Hantzsch-típusú reakciójában, melyet mikrohullámú besugárzással kívántunk megvalósítani.

Első lépésben az izatin, dietil-(2-oxopropil)foszfónát és butil-amin Hantzsch-típusú modellreakcióját tanulmányoztuk különböző körülmények között (hőközlés, hőmérséklet, reakcióidő, molarányok, katalizátorok), majd a reakciót további vegyületekre is kiterjesztettük. Célunk volt továbbá a kapott termékek kiperarálása, teljes analitikai jellemzése, valamint biológiai aktivitásának és a reakció mechanizmusának tanulmányozása is. A reakciók nyomon követését ^{31}P NMR spektroszkópiával, valamint HPLC-MS módszerrel végeztük.



1. ábra: Spirooxindol-dihidropiridin-biszfoszfónátok előállítása

Referenciák:

- [1] Khorrami, A. R.; Kiani, P.; Bazgir, A., *Monatshefte Für Chemie*, **2011**, (142), 287–295.
- [2] Zhou, L.-M.; Qu, R.-Y.; Yang, G.-F., *Expert Opinion on Drug Discovery*, **2020**, (15), 603–625.
- [3] Khedkar, S.; Auti, P., *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, **2014**, (14), 282–290.



HETEROAROMÁS KAPSAZICINOIDOK ELŐÁLLÍTÁSA ÁRAMLÁSOS KÉMIAI RENDSZEREKBE

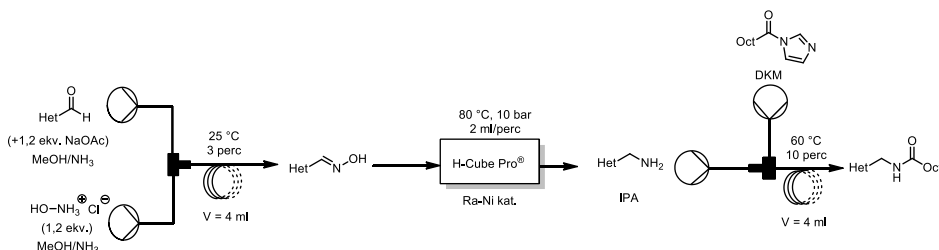
Gyöngyössy Ádám, Orosz János Máté, Bálint Erika

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Innovatív Gyógyszeripari és Kirootechnológiai Kutatócsoport

A kutatás célvegyületei a heterociklusos kapszaicinoidok, melyek. szubsztituált homociklusos analógjai, a kapszaicin, valamint a nonivamid („szintetikus kapszaicin”) az irodalomban jól leírt és jellemzett vegyületek, gyakran használják őket az élelmiszer-, valamint a gyógyszeriparban egyaránt [1-2]. A kutatómunka során célul tűztük ki az irodalomban eddig még ismeretlen heterociklusos kapszaicin analógok előállításának tanulmányozását.

A kutatómunka előzményeként szolgál a kutatócsoportunkban már kidolgozott homociklusos kapszaicinszármazékok hatékony áramlásos kémiai szintézise [3].

A célvegyületeket három reakciólépésen (oximképzés, redukció, acilezés) keresztül kívántuk előállítani, mely során először az egyes reakciók optimalizálását végeztük el modellreakciók segítségével, ahol több paraméter hatását is vizsgáltuk. Az oximképzési reakció során szobahőmérsékleten, bázis, illetve hidroxilamin-hidroklorid reagenssel, metanolban, 3 perc tartózkodási idő mellett 99%-os átalakulást értünk el. A hidrogénezési lépés során szelektivitási probléma lépett fel, melyet kísérletterv segítségével oldottunk meg, így a reakciót az optimálisnak talált körülmények között, 77-83%-os konverzióval valósítottuk meg. Az aminokat fűtött csőreaktorban aktivált nonánsavval reagáltattuk, mely során a nonánsavamidokat közepes, illetve jó (43-58%) termeléssel kaptuk.



1. ábra: Heterociklusos kapszaicinoidok szintézise áramlásos kémiai rendszerekben

Referenciák:

- [1] Basith, S.; Cui, M.; Hong, S.; Choi, S., *Molecules*, **2016**, (21), 10.
- [2] Bode, A. M.; Dong, Z., *Cancer Research*, **2011**, 2811.
- [3] Orosz, J. M.; Rávai, B.; Mátravölgyi, B.; Bálint, E., Flow synthesis of capsaicin and capsaicinoid analogues. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, **2024** (revízió alatt).

FOTOKATALITIKUS RENDSZEREK FEJLESZTÉSE ÉS ALKALMAZÁSA C-ALKILEZÉSI REAKCIÓKBAN

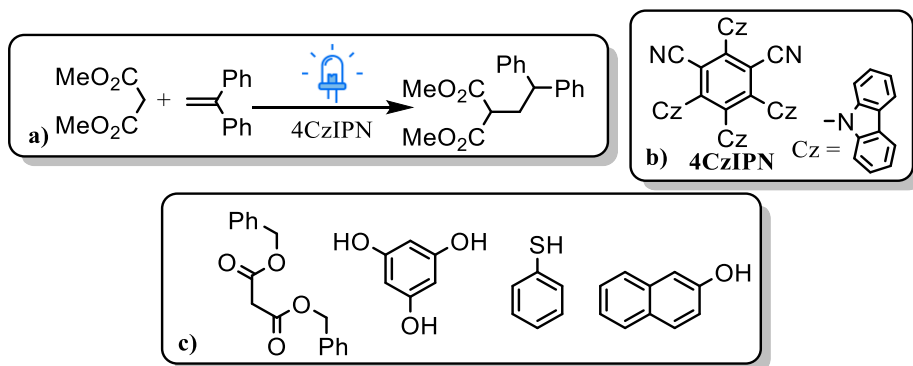
Gémes Gergő¹, Richter Dóra¹, Kisszékelyi Péter², Kupai József¹

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

²Comenius University Bratislava, Department of Organic Chemistry, SK-842 15 Bratislava, Ilkovičova 6.

A fotokatalízis napjainkban reneszánszát éli. A legnagyobb előnye, hogy alkalmazásával kifejezetten enyhe körülmények között végezhetünk átalakításokat. Ez hasznos lehet a fejlett gyógyszer intermedierek funkcionálizálása esetén.

Munkám során céлом volt egy robusztus fotokatalitikus rendszer kialakítása, ami elengedhetetlen az ismételhető és reprodukálható eredményekhez. Több kísérleti elrendezést is kialakítottam, többek között egy nyílt forráskódú 3D nyomtatott fotoreaktor tervet is felépítettem [1]. A reaktor pontosan beállítható fényintenzitással rendelkezik, lehetőséget ad párhuzamos reakciók kivitelezésére, illetve képes a reakcióelegyek termosztálására. A reaktorokat irodalomban ismert reakciókkal teszteltem. Munkám során előállítottam egy nagy lehetőséget tartogató fémionmentes fotokatalizátort is, a 4CzIPN-t. (1. ábra, b) A katalizátort alkalmaztam ez egyik C–C kapcsolási próbareakcióban, (1. ábra, a) illetve megkíséréltem a reakció kiterjesztését további szubsztrátokra. Eddig négy új szubsztrátot találtam. (1. ábra, c) A továbbiakban az új reakciók optimalizálását tervezem a 3D nyomtatott reaktorban.



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

Referenciák:

[1] Schiel, F.; Peinsipp, C.; Kornigg, S.; Böse, D., *ChemPhotoChem*, **2021**, (5), 431–438.



POLIASZPARTAMID ALAPÚ SZUPERMAKROPÓRUSOS GÉLEK

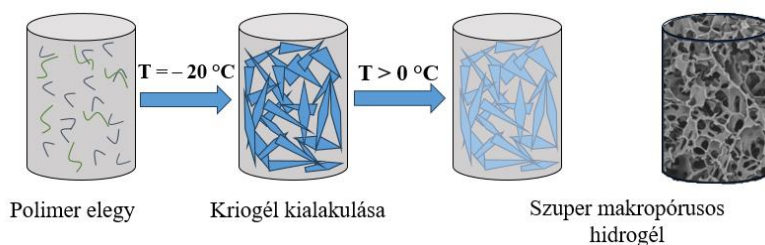
Szabó Domonkos, Gyarmati Benjámín, Szilágyi András

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Munkánk során kriogélesítéssel technikával állítottunk elő szupermakropórusos hidrogéleket. Célunk az volt, hogy az előállított gél alkalmas legyen sejtek és fehérjék tisztítására. Az általunk szintetizált poliszukcinimidet diamino-butánnal módosítottuk, így egy amin csoporttal funkcionizált vízoldható poliaszpartamidot kaptunk, melyet vizes oldatban, az oldószer fagyáspontja alatt poli(etilén-glikol)-diglicidil-éterrel térhálósítottunk. Az alacsony hőmérsékleten bekövetkező fázisválasztás eredményez az eddigi kísérleti eredményeink alapján.

A polimerek kémiai szerkezetét ^1H NMR spektrumok felvételével igazoltuk. A kriogélesítés után kialakuló pórusszerkezetet pásztázó elektronmikroszkópiával tanulmányozzuk. Makroszkopikus szinten mechanikai tesztelő berendezéssel vizsgáljuk az előállított hordozók mechanikai tulajdonságait. Ezen tapasztalatok alapján egy olyan kísérleti elrendezést állítottunk össze, amely segítségével vizsgálható a hidrogélek folyadékáteresztő képessége.

További céljaink között szerepel, hogy enzimeket rögzítsünk a hordozók felszínén lévő szabad amin csoportokra.



1. ábra: A kriogélesítés folyamata

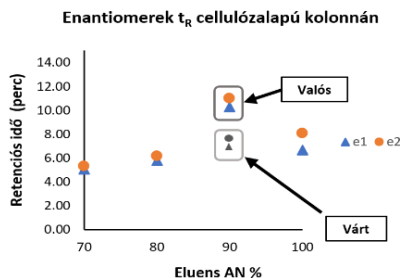
A MOZGÓFÁZIS HATÁSÁNAK VIZSGÁLATA ATROPIZOMER-VEGYÜLETEK KIRÁLIS MÓDSZERFEJLESZTÉSE SORÁN

Nguyen Thuy Hong Ha, Mátravölgyi Béla

Budapest Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Az elmúlt években az újonnan engedélyezett kismolekulás királis gyógyszerek jelentős százaléka enantiomertiszta formában kerülnek forgalomba [1]. Ezzel párhuzamosan az enantiomerek részletes vizsgálatának és arányának meghatározása szerepe tovább növekedett. Ezen alapvető feladat a gyógyszeriparban direkt királis HPLC módszerekkel, enantiomertiszta poliszacharid-alapú állófázisok segítségével történik. A módosított poliszacharid-alapú töltetű oszlopok esetén a mozgófázis hatása a retencióra nem csak az eluens erősségében mutatkozik meg. Hanem például az egyik legszélesebb körben alkalmazott amilóz alapú szelektor mozgófázis előéletfüggő viselkedésében is kiemelkedő szerepet tölt be [2].

Kutatásom céljából tűztük ki, hogy feltérképezzünk több cellulózalapú királis szelektor acetonitril (AN) és a kis szénatomszámú alkoholok által alkotott eluenselegyekben kialakuló magasabb rendű konformáció megváltozásait. Munkánk során részletesebben megvizsgáltunk egy érdekes szerkezeti változást AN/metanol (MeOH) = 90/10 és tiszta AN eluensösszetételi pontok között. Valamint egy kiválasztott cellulózalapú szelektor retenciós előéletfüggését.



1. ábra: Enantiomerek retenciós idejének összehasonlítása AN/MeOH eluens rendszerben cellulózalapú kolonnán.

A kutatómunka Széchenyi Terv Plusz támogatásával, a Nemzeti Laboratóriumok Program támogatási keretéből finanszírozott Gyógyszerkutató és Fejlesztő Laboratórium projekt (PharmaLab, RRF-2.3.1-21-2022-00015) keretében valósult meg.

Ezúton szeretnék köszönetet mondani az EUROAPI Hungary Kft.-nek a kutatómunkánk anyagi támogatásáért.

Referenciák:

- [1] McVicker, R. U.; O'Boyle, N. M., *Journal of Medicinal Chemistry*, **2024**, (67), 2305-2320.
- [2] Horváth, S.; Eke, Zs; Németh, G.; *Journal of Chromatography A*, **2018**, (1568), 149-159.



SEJTOSZTÓDÁSGÁTLÓ HATÁSÚ, FOSZFINTARTALMÚ VINDOLIN- ÉS KRIZINSZÁRMAZÉKOK ELŐÁLLÍTÁSA

Halmai Mónika, Hazai László, Keglevich Péter

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.

A vindolin egy Vinca alkaloid monomer, mely önmagában nem rendelkezik antiproliferatív hatással, viszont megfelelő farmakofórokkal kapcsolva alkalmas lehet a rák kezelésére. A flavonoidok a természetben gyakran előforduló növényi metabolitok, melyek széles spektrumú biológiai aktivitással rendelkeznek, köztük tumorelles hatással. Egyik képviselőjük a krizin (5,7-dihidroxiflavon), mely képes apoptózist okozni a sejtekben [1]. Potenciális farmakofórok lehetnek a trifenilfoszfín és származékai. Korábban kimutatták, hogy a trifenilfoszfín magas lipofilitásából adódóan könnyen átjuthat a sejtmembránon és felhalmozódhat, mely alkalmassá teheti a daganatos sejtek kezelésére [2].

Munkám során célom volt olyan új, foszfinszármazékokkal kapcsolt vindolin- és krizintartalmú hibridek előállítása, melyek daganatellenes hatásúak, és esetlegesen szelektívebbek vagy kevésbé mérgezőek elődeiknél. A farmakofórokat a vindolin 17-es helyzetébe terveztem kapcsolni linkerek segítségével, így elsőként az ott lévő észtercsoportot távolítottam el hidrolízissel. Ezt követően a 17-dezacetilvindolint acileztem brómkarbonsavakkal. A szerkezet-hatás összefüggés vizsgálata érdekében két egyenes szénláncú és két merevebb linker kialakítását céloztam meg. Végül az egyenes szénláncú linkert tartalmazó vegyületeket 6 foszfinszármazékkal, a merevebb linkereket tartalmazó intermediereket pedig trifenilfoszfínnel kapcsoltam. A krizint elsőként 1,4-dibrómbutánnal mono-O-alkileztem a 7-es helyzetben a linker kialakítása érdekében. A keletkezett intermediert végül 8 foszfinszármazékkal reagáltattam. Összességében sikerült 21 új hibrid molekulát előállítanom.

A vegyületeket az amerikai Országos Rákkutató Intézetben (NCI) vizsgálták meg, mely során több vegyület is kiugró sejtosztódásgátló hatást mutatott. Eredményeim felhasználásával egy tudományos közlemény is született.

Referenciák:

- [1] Mayer, S.; Nagy, N.; Keglevich, P.; Szigetvári, Á.; Dékány, M.; Szántay, C. Jr.; Hazai, L., *Chemistry & Biodiversity*, **2022**, (19), e202100725.
[2] Tsepaeva, O. V.; Nemtarev, A. V.; Abdullin, T. I.; Grigor'eva, L.; R., Kuznetsova, E. V.; Akhmadishina, R.; A., Mironov, V. F., *Journal of Natural Products*, **2017**, (80), 2232–2239.



KEMOTERÁPIÁS SZEREKKEL INDUKÁLT MUTAGENEZIS KIMUTATÁSA 3D-PCR-REL

Mócza Levente András¹, Békési Angéla^{2,3}, Holub Eszter⁴

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki kar, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 1.

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 1.

³HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Enzimológiai Intézet, Genomi Metabolizmus Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.

⁴Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Biológia Doktori Iskola, 1117 Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A.

A kemoterápiás szereket a rákterápiában használják, mert hatékonyan elpusztítanak rákos sejteket, vagy előidéznek olyan biokémiai folyamatokat, amelyek a rákos sejtek pusztulását eredményezik. Ilyen rákterápiás stratégia a timidilát bioszintézis gátlása is, mely egyrészt gátolja a DNS szintézist azáltal, hogy a szükséges dTTP építőkö termelődése gátolt, másrészt egy emelkedett dUTP/dTTP arány miatt az uracil DNS-be épülését serkenti, ami hibaként értelmeződik a javító mechanizmusok számára. Az uracil DNS-be épülését kettő kulcsfontosságú enzim hivatott megelőzni, illetve akadályozni: a dUTPáz és a timidilát-szintáz. Van kettő gyakran használt kemoterápiás szer, amelyek a timidilát-szintázal kölcsönhatásba lépnek, akadályozva funkcióját: az 5-fluoro-2'-deoxiuridin (5FdUR) és a Raltitrexed (RTX) antifolat. Ezek az ágensek a timidilát-szintáz gátlásával megemelik a dUTP/dTTP intracelluláris arányát, megnövelve a valószínűségét az uracil DNS-be épülésének. Bizonyos ágensek használata esetén DNS-javításban deficiens genetikai háttéren másodlagos mutagenezist figyeltek meg, ami a terápiás szándékkal szemben katalizálja a tumorprogressziót, és drogrezisztenciát is okozhat. Az egyik leggyakoribb mutagén átalakulás a DNS-bázisok körében az ún. C→T átmenet, amely során a DNS-beli citozin uracillá alakul egy dezamináció eredményeként.

Kísérleteim célja volt egy PCR-alapú technika, a 3D-PCR beállítása és tesztelése 5FdUR-kezelt sejtekből (amelyekben az uracil-DNS-glikozilázok és a hibaspár-javítás gátolva voltak) izolált DNS-en, hogy egy egyszerűbben és gyorsabban kivitelezhető módszert találjak a C→T mutáció detektálására.



MIKROTÁLCÁK PVDF-SZŰRŐMEMBRÁNJÁNAK KÉMIAI FUNKCIONALIZÁLÁSA

*Spátay Sára¹, Jávor Bálint¹, László Szabolcs², Ádám Bálint Árpád¹, Fűrjes Péter³,
Illés Levente³, Tóth Tünde^{1,4}, Huszthy Péter¹, Golcs Ádám^{1,5}*

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék,
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.

³HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet, 1121 Budapest,
Konkoly-Thege Miklós út 29-33.

⁴HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, 1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.

⁵Semmelweis Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Intézet, 1092 Budapest, Hőgyes Endre utca 9.

A mikrotálca alapú rendszerek a nagy áteresztőképességű kísérletek egységes 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 segédeszközök kezelése, a módosításukra összpontosító fejlesztések a modern alkalmazott kutatások kiemelt területei. Egy általánosítható módszerrel lehetővé tettük porózus PVDF polimer kovalens funkcionálizálását, mely 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 plazmát és két különböző kémiai felületkezelést dolgoztunk ki és hasonlítottunk össze a gyakorlati megvalósítás, a polarizációs hatások, a funkcionálizálás hatékonysága, valamint a morfológiára és a porozításra gyakorolt hatás szempontjából.

BORÁN KATALIZÁTOROK SOKOLDALÚ SZEREPE AZ ALDEHIDEK ÁTALAKÍTÁSÁBAN

Győrfi Sára^{1,2}, Forman Ferenc², Hegedűs Kristóf², Soós Tibor²

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8., F épület, II. lépcsőház, magasföldszint

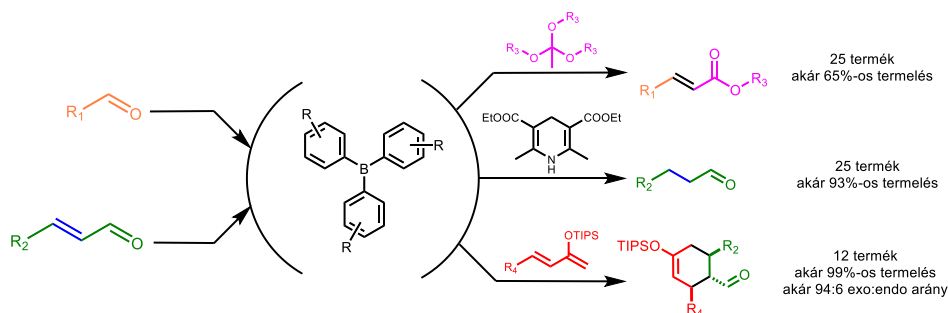
²HUN-REN TTK, Szerves Kémiai Intézet, Organokatalízis Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja. 2.

Munkám során három újszerű triaril-borán katalizált aldehid átalakításon dolgoztam. Ezek közül az első telítetlen aldehidek szelektív redukciója volt Hantzsch-észterrel organokatalizátor jelenlétében. Ezzel a reakciótypussal már a XX. században számos publikáció foglalkozott, de ezek a reakciók legtöbb esetben fémkatalizátor mellett vagy igen nagy katalizátor mennyiség mellett működtek [1].

A második vizsgált reakcióként egy aldol kondenzációval foglalkoztam, ahol alifás aldehideket alakítottam át α,β -telítetlen észterekké.

A két reakciót megvizsgáltam egymás után is, mint tandem reakció, ami szintén egy újszerű eredmény, mivel a korábbi irodalomban fahéjaldehid származékokból csak fémkatalízis mellett sikerült α,β -telítetlen észtereket előállítani [2].

Harmadik reakcióként pedig egy *exo* szelektív oxo-Diels-Alder reakcióval foglalkoztam. Munkám alapjául kutatócsoportunk egy korábbi cikke szolgált [3], ahol Bakos Mária és társai *exo* szelektíven hajtottak végre oxo-Diels-Alder reakciót aldehideken és észtereken.



I. ábra: A három új reaktivitás összefoglaló ábrája

Referenciák:

- [1] Gao, Y.; Wang, J.; Han, A.; Jaenicke, S.; Chuah, G. K., *Catalysis Science & Technology*, **2016**, (6), 3806–3813.
- [2] Staudinger; Schneider, *Chemische Berichte*, **1923**, (56), 706.
- [3] Bakos, M.; Dobi, Z.; Fegyvermeki, D.; Gyömöre, Á.; Fernández, I.; Soós, T., *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, **2018**, (6), 10869–10875.

A GLIKOKÁLIX SEJTADHÉZIÓBAN BETÖLTÖTT SZEREPÉNEK KÍSÉRLETI ÉS ELMÉLETI VIZSGÁLATA

Kiss Dorina, Kovács Boglárka, Magyaródi Beatrix, Balogh Anna

*HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Nanobioszenzorika
Laboratórium, 1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.*

A glikokálix a sejt felszínén megtalálható szénhidrátban gazdag, gél-szerű, negatív töltésű struktúra. Számos funkciója közül az egyik legfontosabb a sejtadhézióban betöltött szerepe, melynek mechanizmusa még nem teljesen megértett. Ez intenzív kutatás tárgya, mivel a rákos sejtek glikokálixja jellegzetes eltéréseket mutat az egészséges sejtekétől, például eltérő a glikozilációjuk és a sejt felszínükön túlexpresszálják az erős glikoziláltságú fehérjéket.

Kutatásomban a glikokálix különböző komponenseit bontó enzimek, mint a heparináz II, neuraminidáz és kondroitináz ABC, hatását vizsgáltam a sejtadhézióra. A kísérletek során több különböző rákos és egészséges sejt vonalat használtunk, és a méréseket egy jelölés nélküli optikai bioszenzor segítségével végeztük RGD-funkcionalizált felületen. A mért adatokra reakciókinetikai modellt illesztettem, amely leírja az integrin-ligandum kötések kialakulását és felbomlását, valamint figyelembe veszi az integrinek adhéziós zónába történő toborzását.

Az elemzés során azt találtam, hogy a glikokálix enzimese emésztése mindegyik sejt vonal esetében befolyásolta az adhézió kialakulásának reakciókinetikáját. Ez a jelenség rávilágít a glikokálix biofizikai tulajdonságainak és a sejt felszín glikozilációjának jelentős sejtadhéziót befolyásoló szerepére. A neuraminidáz esetében megfigyeltem karakterisztikus különbségeket a rákos és egészséges sejt vonalak kitapadására gyakorolt hatása között. Emellett a heparináz II által kiváltott hatásokban is univerzális trendeket azonosítottam. Az eredményeket a reakciókinetikai modellel meghatározott paraméterek változásainak és különböző statikus biofizikai modellek segítségével értelmeztem.

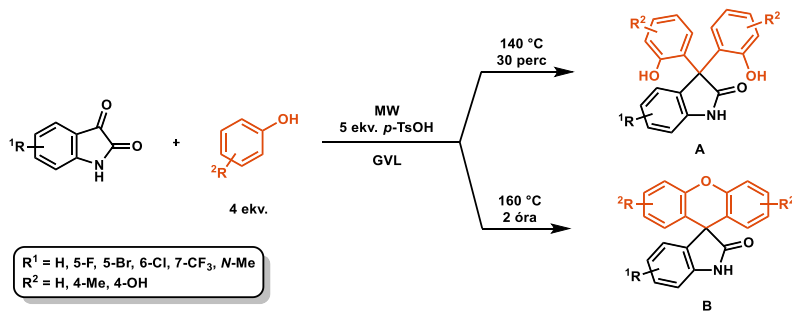
3,3-DISZUBSZTITUÁLT OXINDOLOK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS ALKALMAZHATÓSÁGUK VIZSGÁLATA

Steinsits Dániel, Rávai Bettina, Bálint Erika

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

Az oxindolalapú vegyületek ígéretes bioaktív tulajdonságaik miatt mára már számos gyógyszerkutatói téma fókuszpontjában állnak. A vegyületsalád képviselői között találunk tumorelles, antimikrobiális és fájdalomcsillapító aktivitással bíró vegyületeket is [1].

Munkánk során célul tűztük ki a 3,3-diaril- és a 3,3-spirooxindolok savkatalizált előállítását. Egy ismert eljárást kívántunk javítani környezetbarát szempontokat figyelembe véve, így mikrohullámú (MW) besugárzás segítségével, egy „zöld”, környezetbarát oldószerben terveztük megvalósítani a reakciókat [2]. Először a reakció optimalizálást végeztük el az izatin és *p*-krezol modellreakcióján keresztül, mely során több paraméter hatását is vizsgáltuk. Az optimalizálás során a hőmérséklet és a reakcióidő változtatásával a reakciót a 3,3-diariloxindolok szelektív képződése felé kívántuk eltolni, továbbá célunk volt a 3,3-spirooxindolok képződését is maximalizálni. Ezután az optimalizált körülményeket kiterjesztettük további izatinok és fenolszármazékok reakciójára is. A termékek felhasználhatóságának vizsgálata érdekében egy modellreakción keresztül konjugálást, fázisoldhatósági vizsgálatok révén zárványkomplekpezést, valamint közreműködés keretében biológiai aktivitási vizsgálatokat is végeztünk.



1. ábra: A 3,3-diariloxindolok (A) és a 3,3-spirooxindolok (B) izatinok és fenolok reakciójával történő előállítása

Referenciák:

- [1] Pakravan, P.; Kashanian, S.; Khodaei, M. M.; Harding, F. J., *Pharmacological Reports*, **2013**, (65), 313-335.
- [2] Yang, H.; Takrouiri, K.; Chorev, M., *Current Organic Chemistry*, **2012**, (16), 1581-1593.

VÁRHATÓAN SETOSZTÓDÁSGÁTLÓ HATÁSÚ β -KARBOLIN-VINDOLIN HIBRIDEK ELŐÁLLÍTÁSA

*Bartha Lilla, Keglevich Péter, Hazai László,
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,
1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.*

Kutatómunkámnak célja új β -karbolin-vindolin hibridek előállítása, melyek antiproliferatív hatással rendelkezhetnek. Előadásom során bepillantást szeretnék nyújtani kutatásom elméleti hátterébe, a hibridek és építőköveik jelentőségébe.

A jelenleg is alkalmazott, kemoterápiás gyógyszerkötélok egyik legnagyobb hátránya a mellékhatások intenzitása és a nem elég jó szelektivitás, mely az egészséges sejtek nagy mennyiségű pusztulásához is vezet. Erre kíván megoldást nyújtani a molekuláris hibridek előállítása, mely az utóbbi években ismét elterjedté vált [1].

Az általam kutatott hibridek alkotóelemei a vindolin és a különböző β -karbolinvázzal rendelkező molekulák. A vindolin a Vinca alkaloidok családjába tartozik. Ezen vegyületek a mitotikus orsó kialakulását, ezáltal az érintett sejtek osztódási ciklusát gátolják. A β -karbolin alkaloidok önmagukban változatos biológiai hatásokkal rendelkeznek, mint antidepresszáns, gyulladáscsökkentő, rákellenes stb. A vindolinnak önmagában nincsen sejtosztódásgátló képessége, azonban az elmúlt években beigazolódott, hogy a megfelelő molekulával kapcsolva hatékony antiproliferatív hatású származékok alakíthatóak ki [2-3].

A vindolin - β -karbolin hibridek ígéretes hatásokat mutattak előző kutatásokban. Én a vindolin 17-es és 10-es pozíciójában kapcsoltam linkerrel keresztül L- és D-triptofán-metilészter formaldehiddel gyűrűzárt formáját. Szintén linkerrel keresztül a 17-es pozícióban triptaminnal hasonló reakciókat végeztem, mely mono- és diacilezett, illetve -alkilezett termékekhez vezetett.

Referenciák:

- [1] Singh, A. K.; Kumar, A.; Singh, H.; Sonawane, P.; Paliwal, H.; Thareja, S.; Pathak, P.; Grishina, M.; Jaremko, M.; Emwas, A.-H.; et al., *Pharmaceuticals*, **2022**, (15), 1071.
- [2] Keglevich, A.; Dányi, L.; Rieder, A.; Horváth, D.; Szigetvári, Á.; Dékány, M.; Szántay Jr., C.; Dhafir, L.; Hunyadi, A.; Zupkó, I.; Keglevich, P.; Hazai, L., *Molecules*, **2020**, (25), 1010.
- [3] Cao, R.; Peng, W.; Wang, Z.; Xu, A., *Current Medicinal Chemistry*, **2007**, (14), 479-500.



KÜLÖNBÖZŐ GRANULÁLÁSI TECHNIKÁK VIZSGÁLATA ÉS FEJLESZTÉSE UGYANAZON A FOLYAMATOS RENDSZEREN

Fekete Dániel, Záhonyi Petra, Nagy Zsombor Kristóf

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A gyógyszeriparban a szakaszos berendezések helyét egyre inkább átveszik a folyamatos technológiák, amelyek gyorsabb méretnövelhetőséget és robusztusabb, rugalmasabb, olcsóbb rendszereket kínálnak. Emellett integrált rendszerekben alkalmazva lehetővé teszik a gyártási folyamatok in-line, valós idejű nyomon követését, mely segítséget nyújt a gyártási folyamatok jobb megértéséhez és optimalizálásához, valamint biztosítja az állandó termékminőséget, ezáltal lecsökkentve a selejtes termékek arányát.

Egy ilyen különösen ígéretes technológia az ikercsigás granulálás. Ez az eljárás hatékonyan javítja a porkeverékek porfolyási tulajdonságait és tablettázhatóságát, miközben alkalmazásával elkerülhető a különböző szemcseméretű alkotók fajtázódása. Könnyen integrálható más rendszerekkel, rugalmasságának köszönhetően mind olvadék, mind nedves granulálás megvalósítható vele, ezenkívül kevesebb energiát igényel és gazdaságosabb.

Munkám során megalkottam egy integrált rendszert, melynek segítségével vizsgáltam az olvadék és a nedves granulálást. A folyamatos rendszer az adagolást, a granulálást, a hűtést/szárítást, az őrlést („regranulálást”) és a tablettázást tartalmazta. Olvadék granulálásnál a koffein hatóanyag tartalmú porkeverékből polietilén-glikol kötőanyag hatására granulátumokat, majd tablettákat készítettem. A folyamat hatására sikerült a kezdeti keverék porfolyási és préselhetőségi tulajdonságain javítanom, a készített granulátumok és tabletták analitikai vizsgálatait felhasználva sikerült optimalizálni a gyártósort, valamint sikerült léptéknövelnem a kiindulási gyártási sebesség 16-szorosára. Nedves granulálás esetében valós időben, in-line nyomon követtem a rendszert. Vizsgáltam a granulátumok szárítási folyamatát közeli infravörös spektroszkópia – angolul Near Infrared Spectroscopy (NIR) – segítségével, valamint a gyártási paraméterek rá gyakorolt hatását. Ehhez felderítettem a granulátumok maradék nedvességtartalma és az aktuális gyártási paraméterek közötti összefüggéseket, melyeket valós időben rögzítettem. Segítségükkel szeretnék a közeljövőben létrehozni egy olyan modellt, mely már a NIR szonda alkalmazása nélkül képes valós időben becsülni a granulátumok nedvességtartalmát a gyártási paraméterek segítségével.

A munkához az NTP-HHTDK-23-0048 pályázat anyagi forrást biztosított.



NATÍV ÉS FUNKCIONALIZÁLT SZILÍCIUM-DIOXID NANORÉSZCEKÉKHEZ RÖGZÍTETT REKOMBINÁNS HUMÁN TIROZIN-HIDROXILÁZ ÁTFOGÓ JELLEMZÉSE

Péli Noémi¹, Koplányi Gábor¹, Molnár Zsófia¹, Balogh-Weiser Diána^{1,2}

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Az emberi szervezetben jelen lévő humán tirozin-hidroxiláz (hTH) enzim kulcsfontosságú szerepet tölt be a dopamin bioszintézisében, átalakítva az L-tirozint dihidroxi-fenilalaninná (L-DOPA). Az L-DOPA és annak metabolitja, a dopamin, létfontosságú neurotranszmitterek az idegrendszer megfelelő működéséhez. Az enzim nem alulműködése révén neurodegeneratív betegségek alakulhatnak ki. Az enzimhelyettesítő terápia lehetővé teszi az enzim hiányának külső forrásból történő pótlását, új terápiás lehetőségeket teremtve. A terápiás alkalmazáshoz szükséges stabilitás, szelektivitás és enzimaktivitás biztosítása érdekében az enzim hordozóhoz rögzítése szükséges lehet. Erre a célra ígéretes megoldás lehet a biokompatibilis és jól funkcionalizálható szilícium-dioxid nanorészecskék (SNP) enzimhordozóként történő alkalmazása. A kutatómunka első fázisában a hTH enzimet glutation-S-transzferáz fúziós fehérjével együtt *E. coli* gazdasejtekben állítottam elő nagy tisztaság és jó hozam mellett. A SNP hordozókat részekeméret kontrollált szintézissel állítottam elő, majd felületükön amino-linkereket alakítottam ki a fehérje ionos kapcsolását biztosítva.

Eredményeim megmutatták, hogy nanohordozókon történő enzimrögzítés hatékonysága minden esetben meghaladta a 70% hozamot. A koloid stabilitás jellemzésére dinamikus fényszóródás és Zeta-potenciál méréseket alkalmaztam, melyek révén elmondható, hogy a rögzítés segítségével csökkenthető a fehérje aggregációja, ami növeli a készítmény stabilitását és biokatalitikus aktivitását. Eddigi eredményeink rámutattak, hogy a hTH enzim nanohordozókhoz történő rögzítése új lehetőségeket kínál a dopamin-függő neurodegeneratív betegségek enzimhelyettesítésen alapuló terápiájában, különösen a nazális gyógyszerformák kidolgozásában.

Referenciák:

[1] Bezem, M. T.; Johannessen, F. G.; Krákenes, T.-A.; Sailor, M. J.; Martinez, A., *Molecular Pharmaceutics*, **2021**, 18 (3), 976-985.



AKRIDIN- ÉS PIRIDIN-EGYSÉGET TARTALMAZÓ ÚJ KORONAÉTEREK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS KOMPLEXKÉPZÉSI TULAJDONSÁGAIK VIZSGÁLATA

Kisfaludi Péter; Huszthy Péter; Golcs Ádám; Tóth Tünde; Agárdi Antal; Spátay Sára
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és
Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A kereskedelemből könnyen beszerezhető és viszonylag olcsó alapanyagokból kiindulva, többlépéses szintézissel kívánunk előállítani piridin- és akridin-egységeket tartalmazó új enantiomertiszta makrociklusokat. Az előállítani kívánt makrociklus racém bisz-piridino kulcsintermedierjét 2,6-piridindimetanolból kiindulva többféle védőcsoport alkalmazásával, majd *Dess-Martin*-oxidáció és *Grignard*-reakció segítségével állítottuk elő. A racém dihidroxivegyületből enzimkatalizált rezolválással tervezzük előállítani annak enantiomerjeit. Az utóbbi enantiomertiszta dihidroxivegyületekből ditozilátokat képzünk, majd ezeket tervezzük reagáltatni egy dihidroxiakridin-származékkal, így szintetizálva az enantiomertiszta új makrociklusokat. A tervezett koronaéterek várhatóan alkalmasak lesznek enantiomerszelektív komplexképzésre, melyek vizsgálatát spektroszkópai módszerekkel kívánjuk elvégezni.

A dihidroxiakridin-származékot 3-metoxibenzoésavból kiindulva nitrálás, katalitikus hidrogénezés, *orto*-brómanizollal történő *Ullmann*-reakció, polifoszforsavas gyűrűzárás, foszfor-pentakloriddal való kezelés, *Grignard*-reakció, majd piridínium kloriddal végzett demetilezés segítségével állítottuk elő. A *Grignard*-reakció során melléktermékként keletkezett bisz-dimetoxiakridin demetilezésével kapott diol tetraetilénglikol-ditoziláttal történő makrociklizációjával egy bisz-koronaétert kaptunk, amely előzetes modellezés alapján a sperminnel és analogonjaival különböző mértékben lesz képes komplexképzésre.



**ABSTRACTS OF
STUDENT
PRESENTATIONS**



SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF ZnO NANORODS

Lucy Nyambura Karanja, Dániel Attila Karajz, Imre Miklós Szilágyi

Budapest University of Technology and Economics, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, H-1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3., Hungary

This study explores the fabrication and characterization of polystyrene (PS) opals and their subsequent transformation into zinc oxide (ZnO) and titanium dioxide (TiO₂) inverse opals for potential photocatalysis and gas sensing applications. The methodology involved the preparation of PS opals through Evaporation Induced Confined Area Assembly (EICAA), obtaining ZnO and TiO₂ inverse opals using atomic layer deposition (ALD) and annealing, and the hydrothermal growth of ZnO nanorods. Various analytical techniques were employed for sample characterization, including thermal analysis, SEM-EDX, XRD, UV-Vis, Raman, and photoluminescence.

Results revealed successful fabrication of PS opals and their subsequent conversion into ZnO and TiO₂ inverse opals. Thermal analysis showed effective removal of the PS template at an annealing temperature of 500 °C. SEM imaging demonstrated the formation of closely packed lattice structures and the growth of ZnO nanorods on the inverse opal surfaces. EDX analysis confirmed the expected composition of the samples. XRD patterns indicated the crystalline nature of the fabricated materials, while Raman spectroscopy provided insights into their vibrational modes. UV-Vis and photoluminescence spectroscopy revealed optical properties suitable for photocatalysis and gas sensing applications.

Future work will focus on further optimizing the synthesis process to enhance the performance of these materials in photocatalysis and gas sensing applications, as well as exploring additional characterization techniques to gain deeper insights into their properties and behavior.



TECHNO-ECONOMIC ASSESSMENT OF CYCLODEXTRIN ON *BACILLUS LICHENIFORMIS*

David Cruz, Sakiyo Jesse, Áron Németh

*Budapest University of Technology and Economics, Department of Applied Biotechnology and Food Science,
Fermentation Pilot Plant Laboratory (F-labor),
H-1111 Budapest, Budafoki str. 6-8., F.bld., FE stair., gf., Hungary*

Cyclodextrins, cyclic oligosaccharides derived from the enzymatic degradation of amylose, possess a unique capability to form complexes with a wide range of molecules, including alkyl glycosides, chiral compounds, aromatic molecules, and proteins. Among these, *Bacillus licheniformis*, a Gram-positive bacterium that can be easily isolated from soil and plant to produce lichenysin, a lipopeptide biosurfactant, has garnered significant interest across various industries including therapeutic, cosmetic, pharmaceutical, and food sectors. However, its industrial production faces significant challenges such as low yield and high raw material costs. In this study, a comprehensive techno-economic analysis was conducted utilizing Alpha, Beta, dimethyl beta, and gamma cyclodextrins to optimize the production of lichenysin in a production plant based in Hungary. Through extensive laboratory studies described in the literature, various scenarios were scaled up and simulated using SuperPro Designer software. The most favorable scenario involved the use of dimethyl beta cyclodextrin, achieving a Unit Production Cost of \$136,518.05/kg MP, with impressive economic indices including a Return on Investment (ROI) of 91.80%, Internal Rate of Return (IRR) of 33.83%, Net Present Value (NPV) of \$188.782 million, and a Payback Time of 1.09 years. These compelling economic parameters demonstrate the potential of cyclodextrins, particularly dimethyl- β cyclodextrin, to improve lichenysin production efficiency and economic viability, paving the way for a more competitive market.



POSZTERSZEKCIÓ KIVONATAI



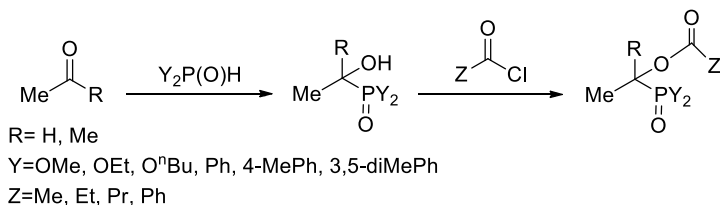
ALFA-HIDROXI-ALKILFOSZFONÁTOK SZINTÉZISE, REAKCIÓI ÉS REZOLVÁLÁSA

Kis Anna Sára, Szalai Zsuzsanna, Schindler József, Keglevich György

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Kutatómunkám során α -hidroxi-alkilfoszfonátok szintézisével, O-acilezési reakcióival és rezolválásával foglalkozom. Az α -hidroxifoszfonátok jelentős biológiai aktivitással és széleskörű felhasználási lehetőséggel rendelkeznek. Enzim inhibitor, antibiotikus és gombaellenes hatásuk is ismert [1,2].

Az α -hidroxi-alkilfoszfonátok előállítása során acetaldehidből vagy acetoneból indultam ki, melyeket korábbi eredményeink alapján [3-5] dialkil-foszfitokkal vagy szekunder foszfin-oxidokkal reagáltattam különböző körülmények között. A kapott vegyületek hidroxi-csoportját különböző savkloridokkal (acetyl-, propionil-, butiril, benzoil-kloriddal) acileztük [2]. A jövőben tervezzük néhány származékunk rezolválását O,O-dibenzoil-R,R-borkósavval [6], illetve az előállított komponensek biológiai aktivitásának vizsgálatát.



1. ábra: α -hidroxi-alkilfoszfonátok előállítása és acilezése

A tudományos eredmények és a publikációk a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Richter Gedeon Talentum Alapítvány (székhely: 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.) támogatásával, „Richter Gedeon Kiválósági PhD Ösztöndíj” keretében készültek. A Doktoranduszi Kiválósági Ösztöndíj Program (DKÖP) által támogatott projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott, valamint a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem közös támogatásával, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatallal kötött támogatási szerződés alapján valósult meg.

Referenciák:

- [1] Pokalwar, R. U.; Hangarge, R. V.; Maske, P. V.; Shingare, M. S., *Arkivoc*, **2006**, (11), 196-204.
- [2] Varga, P. R.; Belovics, A.; Bagi, P.; Tóth, Sz.; Szakács, G.; Bősze, S.; Szabó, R.; Drahos, L.; Keglevich, G., *Molecules*, **2022**, (27), 2067.
- [3] Keglevich, G.; Rádai, Z.; Kiss, N. Z., *Green Processing and Synthesis*, **2017**, (6), 197-201.
- [4] Keglevich, G.; Tóth, V. R.; Drahos, L., *Heteroatom Chemistry*, **2011**, (22), 15-17.
- [5] Varga, P. R.; Hägele, G.; Keglevich, G., *Tetrahedron Letters*, **2021**, (68), 152902.
- [6] Rádai, Z.; Bagi, P.; Czugler, M.; Karaghiosoff, K.; Keglevich, G., *Symmetry*, **2020**, (12), 758.



KISVÍZGYŰJTŐK VESZÉLYES ANYAG TERHELÉSÉNEK BECSLÉSE KOMPOZIT MINTAVÉTELEK ALAPJÁN

Lajkó Tímea, Clement Adrienne, Kardos Máté Krisztián,

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vízi Közmű és Környezetmérnöki Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3., K. ép. mf. 33.

Természetes vizeink szennyezettsége egyre kritikusabb, sürgetőbb problémakör. A folyók vízhozama – és a terhelés – hirtelen változó viselkedést mutat, befolyásolja a csapadék mennyisége, a felszíni lefolyás. A szennyezés jelentős része a kis időtartamú, hirtelen nagy vízhozam-növekedést okozó árhullámokhoz köthető. Dolgozatom célja a terhelésbecslési módszer pontosítása alaphozam-leválasztás segítségével, melyhez a Lyne-Hollick, Eckhardt és Rimmer-Hartmann módszerek kerültek kiválasztásra. Mindhárom módszert a Somogy vármegyei Koppány-patak két mérőállomásán, Törökkoppány és Tamási adatsorain alkalmaztam.

A területen órás vízhozam mérése mellett ötpercenkénti elektromos vezetőképesség és zavarosság, mint vízminőségi jellemzők folyamatos regisztrálása is zajlik. A számítást segítette a területen alkalmazott rétegzett mintavétel, ami egy meghatározott vízhozam küszöbértékre bekapcsoló automata mintavevővel történik. A számítás és a kiértékelés az R programnyelv használatával zajlott.

A Törökkoppányra becsült alaphozam-index 0,60 (L-H.) és 0,57 (Eckhardt), míg Tamásira 0,86 (L-H.) és 0,57 (Eckhardt). A L-H. filter alapján Törökkoppányban az éves 4634 kg fémvegyület terhelés 91,7%-a, az éves peszticid terhelés (87 kg) 98%-a árhullámhoz köthető. Az Eckhardt módszer eredményei kismértékben térnek el Törökkoppány esetében. Tamásiban a becsült éves fémterhelés 3488 kg (L-H.) illetve 7408 kg (Eckhardt), amelynek 62% (L-H.) ill. 88%-a (Eckhardt) származik nagyvízi eseményekből. A becsült éves peszticid terhelés 63 kg (L-H.) illetve 171 kg (Eckhardt). A fenolok, PAH- és PFAS-vegyületek az alaphozamban jellemzőek, és nem haladják meg az 1-2 kg/év értéket. Annak megértéséhez, hogy a két módszer miért mutat ilyen eltérő eredményeket Tamási esetében, a Rimmer-Hartmann módszer megfelelő megoldás lehet.

A bemutatott kutatás a NKFIH támogatásával a Víz tudományi és Vízbiztonsági Nemzeti Laboratórium című, RRF-2.3.1-21-2022-00008 számú projekt, illetve az OTKA SNN 143868 számú támogatáson keresztül valósult meg. A kutatás az Európai Unió támogatásával, az RRF-2.3.1-21-2022-00004 azonosítójú, Mesterséges Intelligencia Nemzeti Laboratórium projekt keretében valósult meg.



ASZPIRIN TABLETTÁK KIOLDÓDÁSÁNAK SPEKTROSKÓPIA ALAPÚ VIZSGÁLATA

Mihályi Gréta Fanni, Nagy Brigitta

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék, FirePharma Kutatócsoport, 1111 Budapest, Budafoki út 8., II. lh., mfszt.

Napjainkban nagy problémát jelent a gyógyszeriparban, hogy a termékeket csak a gyártási folyamat befejeztével lehet ellenőrizni. Erre kínál megoldást a folyamatellenzési technológia (Process Analytical Technology, PAT) és a valós idejű felszabadítás (Real Time Release Testing, RTRT) elve, melynek fontos részét képezik a különféle roncsolásmentes, spektroszkópiai vizsgálatok.

Munkám során NIR- és Raman-spektroszkópiával vizsgáltam aszpirin tablettákat, és ezekből az adatokból vontam le következtetéseket az adott tabletták kioldódására. Vizsgált paramétereknek a hatóanyag szemcseméretét, a szétejtő (kroszkarmellóz-Na, Ac-Di-Sol) mennyiségét és a tablettázásnál használt nyomóerőket választottam, mivel ezek befolyásolják a tabletták szétválását és oldódását a sebességét. A kioldódást MATLAB-ban történő elemzéssel, a legkisebb négyzetek módszerével (Partial Least Squares, PLS) és mesterséges neurális háló (Artificial Neural Network, ANN) vizsgáltam meg. A kapott eredményeket összehasonlítva kiválasztottam a legjobbnak tűnő modellt.



SZÉNHYDROGÉNEKKEL SZENNYEZETT BIOFILMBŐL IZOLÁLT BAKTÉRIUMOK JELLEMZÉSE ÉS VIZSGÁLATA

*Szentgyörgyi Flóra^{1,3}, Benedek Tibor¹, Fekete Dzszenifer², Táncsics András¹,
Harkai Péter³, Kriszt Balázs³,*

¹Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, Molekuláris Ökológia Tanszék, Mikrobiális Ökológia
Kutatócsoport

²Pannon Egyetem, Körforgásos Gazdaság Egyetemi Központ, Soós Ernő Kutató-Fejlesztő Központ,
Nagykanizsa,

³Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, Akvakultúra és Környezetbiztonsági Intézet

A szénhidrogének olyan energiaforrások, melyeket a mindennapi életben és az iparban egyaránt alkalmazunk. Emellett a szénhidrogének és származékai komoly környezeti kockázatot jelentenek, hiszen karcinogének, teratogének és mutagének, ezáltal az ökoszisztémára és az élőlényekre nézve problémát okoznak. Környezetbe való kijutásuk a talajban található vízkészleteket is veszélyeztethetik. A szennyezett helyszínek helyreállítása fontos feladat. A kármentesítő technológiák során egyre inkább preferálják a szennyező anyagok teljes megsemmisítését, nem pedig az ártalmatlanítás szokásos megközelítését, amikor a szennyezés gyakran egyik közegből egy másikba kerül át (pl. fiziko-kémiai eljárások). A bioremediáció, mikroorganizmusok, vagy a mikrobiális folyamatok felhasználása az egyik legfenntarthatóbb, leginnovatívabb és legzöldebb eljárás.

Kutatásunk célja egy egyidejűleg biofilm képző és szénhidrogénbontó képességgel is rendelkező bakteriális konzorcium kifejlesztése, mely a jövőben innovatív biofilm alapú in situ bioremediációs rendszerek (reaktív biorésfalak) kifejlesztésének nyújthat potenciális alapot. Munkánk egyik fontos alaplépése, a konzorcium kialakításának előfeltétele, a közösséget alkotó eltérő tulajdonságokkal rendelkező baktériumok egyazon tápközegben való nagy számban történő együtt szaporodásának meghatározása. Ezáltal vizsgálataink első lépéseként jó biofilmképző és BTEX-bontó képességgel rendelkező baktériumtörzsek (*Pseudomonas sp.* BFHA4_7, *Variovorax paradoxus* BFB1_13) tenyésztési körülményeit optimalizáltuk. Meghatározásra kerültek a tenyésztési paraméterek (tápoldat, hőmérséklet, NaCl koncentráció, pH), melyek mellett a vizsgált baktériumok jó növekedést mutattak. Következő lépésként együtt-tenyésztési vizsgálatoknak vetettük alá őket hagyományos tenyésztéses és molekuláris mikrobiológiai módszerekkel. A kutatás végső szakaszában a kialakított bakteriális konzorcium mikrokozmosz kísérletekben történő BTEX biodegradációs képességének tesztelése valósult meg.



ABSTRACTS OF STUDENT POSTERS

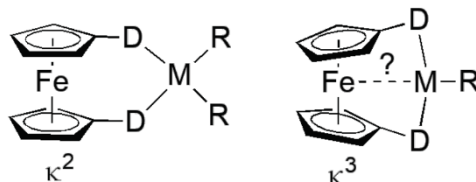
DECIPHERING THE DIRECT HETEROMETALLIC INTERACTION IN CASE OF K^3 -BIS(DONOR)FERROCENYL-TRANSITION- METAL COMPLEXES

Máté Bartek¹, Eszter Makkos^{1,2}, Zsolt Kelemen¹

¹Budapest University of Technology and Economics, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Modern Inorganic Materials Research Group, H-1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3., Hungary

²Budapest University of Technology and Economics, ELKH-BME Computation Driven Chemistry Research Group, H-1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3., Hungary

Ferrocene based phosphorus ligands have exerted significant influence in the field of catalysis [1]. The κ^3 -coordination mode of donor bridged ferrocenyl ligands features a heterobimetallic interaction. Although the presence of the interaction is undoubted, the quantification of its strength is not well established with current experimental and theoretical methods. It has been proposed that the heterobimetallic distance is highly dependent on the surrounding ligand system and is mainly a function of the dispersion forces in bisamidinate ferrocene ligands [2].



D = PPh₂, NPEt₃, PtBu₂, S

Me = Pd, Ni, Fe, Co, Ru

R = Cl, PPh₃, Me

Fig. 1. Representative structures

In our study, several representative structures were studied via density functional methods to shed light on this interaction in related representative structures. Correlation analysis was performed between geometric parameters, natural charges and QTAIM parameters, which show that the resulting bond critical points might not be appropriate to quantify the interaction.

References:

[1] Roesky, P.; et al., *ACS Omega*, **2022** (7), 4683–4693.

[2] Ringenberg, M. R., *Chemistry – A European Journal*, **2019**, (25), 2396–2406.

INVESTIGATION AND OPTIMIZATION OF IMMOBILIZATION OF HISTIDINE-TAGGED ENZYMES.

Anna Zrinyi¹, Bálint Alács¹, László Poppe^{1,2,3}, Evelin Bell¹

¹Budapest University of Technology and Economics, Department of Organic Chemistry and Technology, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, H-1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3., Hungary

²Babes-Bolyai University of Cluj-Napoca, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Biocatalysis and Biotransformation Research Centre, RO-400028 Cluj-Napoca, Arany János Str. 11., Romania

³SynBiocat Ltd., H-1172 Budapest, Szilasliget u. 3., Hungary

During my research work, my goal was to investigate the selective enzyme immobilization methods previously used in our research group. During selective enzyme immobilization, histidine-tagged enzymes were immobilized on surface-modified polymer supports. Previously, optimization experiments were carried out, during which a solid polymer containing epoxy groups was modified with a mixture of amines and bisamines. Metal ion complexing groups were formed via the modification of bisamines with ethylene diamine dianhydride. Continuing this work, I expanded the range of applied surface modification agents, and I investigated the effect of surface modification on the immobilized biocatalysts. In the first experiments, phenylalanine ammonia-lyase from parsley was used as a model enzyme.

This enzyme immobilization method is based on the recombinant proteins labeled with histidine and the side chains of this amino acid selectively form a complex with the metal ion immobilized on the surface. After the quick complexation, the covalent bond formation takes place through the epoxy groups of the support.

During the immobilization, cobalt ions were used in all cases to form the metal-protein complex. After the immobilization, the biocatalysts were tested in the ammonia elimination reaction of phenylalanine. Based on the results, while the quality of the bisamines barely affected the activity, the monoamines had a significant effect on the final biocatalyst activity.

The research was performed in the frame of project no. RRF-2.3.1-21-2022-00015 has been implemented with the support provided by the European Union.



JEGYZETEK



JEGYZETEK



Szerkesztő: Balogh Marcell János

Kiadó: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
BME Szent-Györgyi Albert Szakkollégium

XVII. Szent-Györgyi Albert Konferencia

ISBN 978-963-421-949-1