

**XVI. SZENT-GYÖRGYI ALBERT
KONFERENCIA**

KIADVÁNYA

2023. ÁPRILIS 21-22.

Előadások és poszterszekció

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Ch épület

A BME Szent-Györgyi Albert Szakkollégium szervezésében



Tartalom

Rövid Program.....	3
Short Programme	4
Részletes program.....	6
Plenáris előadások kivonatai.....	11
Diákelőadások kivonatai.....	22
Abstracts of student posters	44
Poszterszekció kivonatai.....	46
Abstracts os student posters.....	51
Jegyzetek.....	53



Rövid program

Péntek, Április 21.		Szombat, Április 22.	
8:30 - 9:30	Regisztráció	9:00 - 10:00	Fogadás, reggeli kávé
9:30 - 10:00	MEGNYITÓ	10:00 - 10:45	Diákelőadások
10:00 - 10:45	Plenáris előadás	10:45 - 11:00	Kávészünet
10:45 - 11:30	Diákelőadások	11:00 - 11:45	Plenáris előadás
11:30 - 11:45	Kávészünet	11:45 - 12:45	Diákelőadások
11:45 - 12:30	Plenáris előadás	12:45 - 13:45	Ebédészünet
12:30 - 13:15	Diákelőadások	13:45 - 14:30	Plenáris előadás
13:15 - 14:15	Ebédészünet	14:30 - 15:30	Diákelőadások
14:15 - 15:00	Plenáris előadás	15:30 - 15:45	Kávészünet
15:00 - 15:45	Diákelőadások	15:45 - 16:15	ZÁRÁS, eredményhirdetés
15:45 - 16:00	Kávészünet	16:15 - 16:45	Búcsú
16:00 - 16:30	Diákelőadások		
16:30 - 18:00	Poszterek bemutatása		
18:00 - 19:30	Vacsora		
19:30 - 21:00	Borkóstoló		



Short programme

Friday, 21th of April.		Saturday, 22th of April	
8:30 - 9:30	Registration	9:00 - 10:00	Reception, breakfast coffee
9:30 - 10:00	OPENING	10:00 - 10:45	Student presentations
10:00 - 10:45	Plenary presentation	10:45 - 11:00	Coffee break
10:45 - 11:30	Student presentations	11:00 - 11:45	Plenary presentation
11:30 - 11:45	Coffee break	11:45 - 12:45	Student presentations
11:45 - 12:30	Plenary presentation	12:45 - 13:45	Lunch break
12:30 - 13:15	Student presentations	13:45 - 14:30	Plenary presentation
13:15 - 14:15	Lunch break	14:30 - 15:30	Student presentations
14:15 - 15:00	Plenary presentation	15:30 - 15:45	Coffee break
15:00 - 15:45	Student presentations	15:45 - 16:15	CLOSING, announcement of
15:45 - 16:00	Coffee break	16:15 - 16:45	Farewell
16:00 - 16:30	Student presentations		
16:30 - 18:00	Poster presentations		
18:00 - 19:30	Dinner		
19:30 - 21:00	Wine tasting		



TÁMOGATÓINK

Ezüst fokozatú támogatók

SERVIER 
moved by you

Együttműködő partnereink



Szakkollégium állandó támogatói



EMBERI ERŐFORRÁS
TÁMOGATÁSKEZELŐ



KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM



Nemzeti
Tehetség Program

A kiadvány nyomtatása Újbuda Önkormányzatának támogatásából valósult meg.



RÉSZLETES PROGRAM



Péntek, Április 21.

- 8:30 - 9:30 Regisztráció, kávé
- 9:30 - 10:00 MEGNYITÓ
- 10:00 - 10:45 **Vécsi István Áron** – Energiatermelés nukleáris reaktorokkal
- 10:45 - 11:00 Kurucz Bálint – A ferroptózis és a JNK útvonal kapcsolatának vizsgálata
- 11:00 - 11:15 Zsiros Boldizsár – Gyors Raman-képkalkotással nyert térképek konvolúciós neurális hálózaton alapuló értékelése a tabletták kioldódás-profiljának előrejelzésére
- 11:15 - 11:30 Szathmári Balázs – Diketonáto-szilol vegyületek előállítása és analitikai vizsgálata – Az első semleges hexakoordinált szilol komplex
- 11:30 - 11:45 KÁVÉSZÜNET
- 11:45 - 12:30 **Dr. Szieberth Máté** – Fenntartható atomenergetika: a nukleáris üzemanyagciklus továbbfejlesztési lehetőségei
- 12:30 - 12:45 Györfi Sára – Aldehidek boránkatalizált reakciói
- 12:45 - 13:00 Németh Barnabás – Az ionizáló sugárzások hatása a tp53 deficiens zebrahal embriókra
- 13:00 - 13:15 Engel Botond – A dohányzás mutagén hatásának modellezése sejtkultúrában



13:15 - 14:15 EBÉDSZÜNET

14:15 - 15:00 **Dr. Répánszki Réka** – Csernobil és Fukushima leszerelési tapasztalatai

15:00 - 15:15 Németh Áron Soma – Izatinalapú spirociklusok és egyéb heterociklusok előállítás

15:15 - 15:30 Jurányi Eszter Petra – Per- és poliszulfidok alkilálási reakciójának vizsgálata

15:30 - 15:45 Ábrahám Eszter – Kiterjesztett PI-rendszerű fluorogén NIR-II jelzővegyületek prekursorainak szintézise

15:45 - 16:00 KÁVÉSZÜNET

16:00 - 16:15 Balogh Marcell János – Macskamenta kevertetéses extrakciójának optimalizációja

16:15 - 16:30 Diószegi Anna – Tablettázási hibák valós idejű felismerése mesterséges intelligenciával

16:30 - 18:00 POSZTERSZEKCIÓ

18:00 - 19:30 VACSORA

19:30 - 21:00 BORKÓSTOLÓ



Szombat, Április 22.

- 9:00 - 10:00 FOGADÁS, REGGELI, KÁVÉ
- 10:00 - 10:15 Ötvös Bettina – The effect of cellulose fibre length on the efficiency of a flame retardant system in poly(lactic acid)
- 10:15 - 10:30 Dénes Laura – RSK aktivitás tanulmányozására alkalmas kísérleti rendszer bemutatása
- 10:30 - 10:45 Bogner Marcell Márk – Diteniletén konjugált dibenzopentalén rendszer szintézise molekuláris elektronikai felhasználásra
- 10:45 - 11:00 KÁVÉSZÜNET
- 11:00 - 11:45 **Feil Ferenc** – Atomerőművi radioaktív hulladékok kezelése
- 11:45 - 12:00 Németh Réka – Polikarbonát metanolízise visszaforgatható katalizátorral és annak optimalizálása
- 12:00 - 12:15 Horváth Ádám – Előállíthatók 2-foszfaanilinek az $[R-N=C=P]^-$ anionok Diels-Alder reakcióval? – számításmos kémiai vizsgálatok
- 12:15 - 12:30 Emödi Nikolett – Az RGS3 fehérje és az onkogén KRas mutánsok kölcsönhatásának vizsgálata
- 12:30 - 12:45 Erdélyi Dóra – Lipofil cinkona-négyzetamid organokatalizátor visszaforgatása és felhasználása a baklofen királis intermedierjének előállítására
- 12:45 - 13:45 EBÉDSZÜNET



- 13:45 - 14:30 **Dr. Osváth Szabolcs** – Radioaktivitás a környezetünkben
- 14:30 - 14:45 Mohácsi Zsombor Márton – Gyógyszerhatóanyagok biomimetikus oxidációs útvonalainak átfogó, elemző vizsgálata
- 14:45 - 15:00 Kiss Johanna – Poli(etilén-tereftalát) visszaforgatható organokatalizátorokkal történő glikolízisének méretnövelése
- 15:00 - 15:15 Baranyi Attila – Szcintillációs koktél hulladékok szilárdítási lehetőségei
- 15:15 - 15:30 Kis Dávid – Egy új, alternatív oldószer szintézise és alkalmazásai
- 15:30 - 15:45 KÁVÉSZÜNET
- 15:45 - 16:15 EREDMÉNYHIRDETÉS
- 16:15 - 16:45 BÚCSÚ



**PLENÁRIS
ELŐADÁSOK
KIVONATAI**



**ABSTRACTS OF
PLENARY
PRESENTATIONS**



ENERGIATERMELÉS NUKLEÁRIS REAKTOROKKAL

Vécsi István Áron

Eötvös Loránd Kutatási Hálózat, Energiatudományi Kutatóközpont

Energiatermelés nukleáris reaktorokkal. Az ideális energiatermeléshez sok kíváncsúnak meg kell felelni. Legyen olcsó és környezetbarát, valamint a termelés alapanyaga legyen elérhető. Ez mind megvalósítható nukleáris reaktorokkal, habár a technológia bonyolultabb a közönséges erőművekben alkalmazottaknál. Az előadásomban bemutatásra kerül a nukleáris energiatermelés módja. Az úgynevezett üzemanyag cikluson keresztül megvizsgáljuk a teljes nukleáris ipart. Meglátjuk, hogy mi történik a nyers uránnal, hogy fűtőelem keletkezzen belőle villamosenergia termeléshez. Végezetül a kiegészítő fűtőelem jövőjét is megismerjük.





POWER GENERATION WITH NUCLEAR REACTORS

István Áron Vécsi

Eötvös Loránd Research Network, Centre for Energy Research

Power generation with nuclear reactors. There are many requirements for an ideal power generation. It must be cheap, environmentally friendly and the resource for the generation must be available. These are achievable with nuclear reactors, although the technology is more complex than what we use in the conventional power plants. I will show in my lecture the method we are using to produce electricity with nuclear energy. My presentation will go through the so-called nuclear fuel cycle to introduce the whole nuclear industry. We will see what happens with the raw uranium ore to become nuclear fuel and to produce electricity. Finally, we will see the future of the spent fuel.



FENNTARTHATÓ ATOMENERGETIKA: A NUKLEÁRIS ÜZEMANYAGCIKLUS TOVÁBBFEJLESZTÉSI LEHETŐSÉGEI

Dr. Szieberth Máté

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Nukleáris Technikai Intézet



A globális klímavédelmi célkitűzések elérése csak az atomenergetika fokozott igénybevétele mellett tekinthető reálisnak. A Nemzetközi Energia Ügynökség becslése szerint ehhez 2050-ig közel duplázódnia kellene a világ atomerőmű-kapacitásának. Egy ilyen növekedés esetén előtérbe kerülnek olyan fenntarthatósági kérdések, mint az uránkészletek hatékony felhasználása és a végleges elhelyezésre kerülő hulladékból fakadó kockázatok minimalizálása. Az előadás bemutatja a nukleáris üzemanyagciklus felépítését és a fenntarthatósági kérdésekre választ adó fejlesztéseket, így az üzemanyagciklus zárásának lehetőségeit, valamint a gyorsneutron-spektrumú reaktorok alkalmazását üzemanyag-tenyésztésre és a hosszútávú kockázatokért felelős izotópok átalakítására.



SUSTAINABLE NUCLEAR ENERGY: ADVANCED NUCLEAR FUEL CYCLE OPTIONS

Dr. Máté Szieberth

Budapest University of Technology and Economics, Institute of Nuclear Techniques

Achieving global climate protection objectives can only be considered realistic with the increased use of nuclear energy. According to the International Energy Agency estimate, the world's nuclear power plant capacity should almost double by 2050. In the face of such growth, sustainability issues such as the efficient use of uranium reserves and the minimization of risks arising from the final disposal of waste come to the fore. The lecture presents the structure of the nuclear fuel cycle and the developments that answer sustainability questions including the closed fuel cycle options and the application of fast neutron reactors for fuel breeding and transmutation of isotopes responsible for the long term risks.



CSERNOBIL ÉS FUKUSIMA LESZERELÉSI TAPASZTALATAI

Dr. Répánszki Réka

Országos Atomenergia Hivatal

Az 1986-os csernobili katasztrófa története sokak számára csak a HBO sikersorozatából ismert. Mivel 2000-ben leállították az erőmű utolsó működő blokkját is, így elmondható, hogy mára az erőmű összes blokkja hideg, leszerelésre váró állapotban van. Azonban a „szovjet hagyaték” nem hétköznapi problémákkal küzd, a várható költségek óriásiak, különleges technika és eszközpark igénye miatt a nemzetközi összefogás az egyetlen lehetőség, melyhez referenciaként lehet majd a japán leszerelési gyakorlatot hozni. A 2011-es Fukusimai eseményeket már mindenki televízión nézte végig, a katasztrófa mértéke azonnal érezhető és mérhető volt. A japán erőműbaleset után a Fukushima prefektúra vezetése úgy döntött, leszereli a sérült (Dai-ici), valamint a rendben leállt és lehűtött (Dai-ii) erőműveket. A tartomány szennyezett területeinek dekontaminálása 12 éve tart, előadásomban szeretném bemutatni az eddig végrehajtott intézkedéseket, a további terveket és kutatási eredményeket, továbbá a médiából is ismert problémák kezelését, egy dózistérképet és a sérült blokkok jelenleg ismert állapotát.





CHERNOBYL AND FUKUSHIMA DECOMMISSIONING EXPERIENCES

Dr. Réka Répánszki

Hungarian Atomic Energy Authority

The story of the Chernobyl disaster in 1986 is known only from the HBO series. Since the last operating unit of the nuclear power plant was shut down in 2000, it can be said that all the units of the power plant are now in a cold state, awaiting decommissioning. However, the „Soviet legacy” suffers from unusual problems, the expected costs are enormous, and due to the need for special technology and equipment, international cooperation is the only option, for which the Japanese decommissioning exercise can be used as a reference. Everyone watched the disaster in Fukushima in 2011 on television, the extent of the disaster was immediately felt and measured. After the Japanese nuclear power plant accident, the management of Fukushima prefecture decided to decommission the damaged (Dai-ichi) and the properly shut down and cooled (Dai-ni) power plants. The decontamination of the contaminated areas of the area has been going on for 12 years, in my presentation I would like to show the implemented actions, the further plans and research results, as well as the treatment of problems (known from the media), a dose map and the currently known state of the damaged units.



RADIOAKTÍV HULLADÉKOK KEZELÉSE

Feil Ferenc

MVM Paksi Atomerőmű Zrt., Radioaktív Hulladékkezelési Osztály

Az atomerőművek üzemeltetése és leszerelése során elkerülhetetlenül keletkeznek radioaktív hulladékok, amelyek kezeléséről, kondicionálásáról, átmeneti és végleges tárolásáról gondoskodni kell. Már az atomerőművek tervezésekor fontos szempont, hogy az üzemeltetés során keletkező radioaktív hulladékok mennyisége és aktivitástartalma az ésszerűen elérhető legalacsonyabb legyen. Az üzemeltetés során keletkező radioaktív hulladékok gyűjtésére, kezelésére, kondicionálására, átmeneti tárolására, minősítésére az üzemeltetőnek megfelelő eszközökkel kell rendelkeznie. A radioaktív hulladékok kezelése során figyelembe kell venni a végleges elhelyezésre vonatkozó követelményeket is, amelyeket az erre a célra szolgáló létesítmény biztonsági elemzéseiből származtatnak. A kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékok végleges elhelyezése sok országban megoldottnak tekinthető. A nagy aktivitású hulladékok végleges elhelyezésével kapcsolatban az az egységes nemzetközi álláspont, hogy egy mélységi geológiai tároló alkalmas a kiegészített üzemanyag közvetlen elhelyezésére, illetve a kiegészített üzemanyag esetleges feldolgozása során keletkezett másodlagos nagy aktivitású hulladékok befogadására is.





MANAGEMENT OF RADIOACTIVE WASTE

Ferenc Feil

MVM Paks Nuclear Power Plant Ltd., Radioactive Waste Management Department

Radioactive waste is inevitably generated during the operation and decommissioning of nuclear power plants, which must be treated, conditioned, temporarily and permanently stored. When planning nuclear power plants, it is an important aspect that the amount and activity of radioactive waste generated during operation should be as low as reasonably possible. The operator must have appropriate equipment for the collection, treatment, conditioning, temporary storage, and qualification of radioactive waste generated during operation. During the management of radioactive waste, the requirements for final disposal, which are derived from the safety analyses of the facility intended for this purpose, must also be considered. The final disposal of low-level (LLW) and intermediate-level radioactive waste (ILW) can be considered solved in many countries. Regarding the final disposal of high-level waste (HLW), the international consensus is that a deep geologic repository is suitable for the direct disposal of used fuel that has been designated as waste, as well as for the reception of secondary HLW generated during the possible reprocessing of used fuel.



RADIOAKTIVITÁS A KÖRNYEZETÜNKBEN

Dr. Osváth Szabolcs

Országos Sugárbiológiai és Sugáregészségügyi Kutató Igazgatóság



A radioaktivitás a természet része. Magyarországon a 489/2015. Kormányrendelet („OKSER rendelet”) értelmében számos szervezet foglalkozik környezetünk sugárzási helyzetének, a környezeti közegek radioaktivitásának monitorozásával. Ez főleg környezeti minták (pl. aeroszol, száraz és nedves kihullás, felszíni vizek, iszap, talaj, növények, állatok) vételét és változatos nukleáris mérési technikákkal történő elemzését jelenti.

Az Országos Környezeti Sugárvédelmi Ellenőrző Rendszer (OKSER) másik nagy feladata az élelmiszerekben (ideértve a csapvizet és az ásványvizet is) lévő radioaktivitás vizsgálata, és a fogyasztásukból származó lakossági sugárterhelés értékelése.

Ugyanakkor a magyar lakosságot érő sugárterhelés legnagyobb része a radon rövid felezési idejű bomlástermékeinek belélegzéséből származik. Ennek mértékét, a kapcsolódó egészségkárosodás kockázatát kívánjuk felmérni az Országos Reprezentatív Radonvizsgáló Programban. Az ORRP-ben való részvétel ingyenes, bármely magyarországi lakó- vagy középület jelentkezését (radon@nnk.gov.hu) köszönettel vesszük.



RADIOACTIVITY IN OUR ENVIRONMENT

Dr. Szabolcs Osváth

National Research Institute for Radiobiology and Radiohygiene

Radioactivity is part of nature. According to 489/2015. Government decree, environmental radioactivity in Hungary is monitored by several organizations. Aerosol, dry-out, wash-out, surface water, mud, soil, plant and animal samples are taken and analyzed by several nuclear measurement techniques.

Radioactivity in food (including tap water and mineral water) is also analyzed, and radiation dose of the population is assessed from the results.

However, main source of radiation dose of Hungarian population is due to inhalation of radon and its short half-life progenies. Its risk is investigated by the National Representative Radon Survey Program. The participation in this program is free of charge, and application of any Hungarian house or public building is welcome (radon@nnk.gov.hu).



DIÁKELŐADÁSOK KIVONATAI



A FERROPTÓZIS ÉS A JNK ÚTVONAL KAPCSOLATÁNAK VIZSGÁLATA

Kurucz Bálint, Szarka András, Varga Dóra

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, Biokémia és Molekuláris Biológia Laboratórium, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A ferroptózis egy, a közelmúltban felfedezett, vasfüggő programozott sejthalál forma. A sejt pusztulásához a nagymértékű lipid peroxidáció vezet.

A JNK jelátviteli útvonal a MAPK kaskádendszer egyik fő útvonala. Általában gyulladásozó jelek vagy növekedési faktorok hatására indul el, szerepet játszhat a sejt túlélésében, valamint az apoptózisban is.

Kutatócsoportunk korábbi eredményei alapján ferroptózis indukáló szerekkel (RSL-3, Erastin) kezelt NRAS és HRAS mutáns sejtekben a JNK inhibitorok felerősítik a ferroptózis hatását. Ezzel szemben az alkalmazott koncentrációban önmagukban nem okoztak sejthalált, valamint ferroptózis inhibitorokkal párhuzamosan kezelve sem alakult ki sejtpusztulás. Ezekből arra következtethetünk, hogy fokozzák a ferroptózist, de nem idéznek elő más típusú sejthalált.

Kutatásom célja, a fent ismertetett kapcsolat háttérben esetlegesen álló fehérje, az FSP1 oxidoreduktáz szerepének tisztázása. A szóban forgó fehérje, az oxidatív stressz kivédésében fontos szerepet játszó ubiquinol/CoenzimQ10-et, képes regenerálni és ezen keresztül segíthet a ferroptózis elleni védekezésben. Munkám során a HT-1080 fibroszarkóma sejtvonal ferroptózis induktorokkal és különböző inhibitorokkal történő kezelésével próbáltunk utánajárni annak, hogy az egyes JNK inhibitorok megváltoztatják-e az FSP1 (fehérje) mennyiségét, vagy akár elhelyezkedését a sejten belül. Ezen túl vizsgálat tárgyává tettük, hogy az egyes kezelőszerek eltérő koncentrációjú kombinációi milyen hatást váltanak ki a sejteken.

Referenciák:

- [1] Varga, D.; Hajdinák, P.; Makk-Merczel, K.; Szarka, A.; *International Journal of Molecular Sciences*. **2022**; 23(19), 11004.



GYORS RAMAN-KÉPALKOTÁSSAL NYERT KÉMIAI TÉRKÉPEK KONVOLÚCIÓS NEURÁLIS HÁLÓZATON ALAPULÓ ÉRTÉKELÉSE A TABLETTA KIOLDÓDÁS- PROFILJÁNAK ELŐREJELZÉSÉRE

Galata Dorián László¹, Zsiros Boldizsár¹, Knyihár Gábor¹, Péterfi Orsolya¹, Mészáros Lilla Alexandra¹, Ronkay Ferenc², Nagy Brigitta¹, Szabó Edina¹, Nagy Zsombor Kristóf¹, Farkas Attila¹

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

²Neumann János Egyetem, GAMF Műszaki és Informatikai Kar, 6000 Kecskemét, Izsáki út 10.

Az előadás alapjául szolgáló munkánkban egy korszerű, gyors Raman képalkotó készülék képességeit használtuk ki, hogy információt nyerjünk a hidroxipropil-metilcellulóz (HPMC) koncentrációjáról és részecskeméretéről a nyújtott hatóanyagleadású tablettákban. A kinyert információt felhasználtuk a tabletták in vitro kioldódási profiljának előrejelzésére. Először alkalmaztunk konvolúciós neurális hálózatokat (CNN) a HPMC eloszlásáról készült kémiai képek feldolgozására és a kép alapján a kioldódási profil közvetlen előrejelzésére. Ezt az új módszert összehasonlítottuk a wavelet-elemzéssel, amely a HPMC-eloszlás textúrájának számszerűsítését adja, és mind a koncentrációra, mind a részecskeméretre vonatkozó információkat hordoz. Összesen 112 kalibráló és 32 validáló tablettát használtunk, amikor a HPMC részecskeméretének jellemzésére CNN-t használtunk, a validáló tabletták oldódási profilját 62,95 átlagos f2 hasonlósági értékkel jósoltuk meg. A kép alapján történő közvetlen előrejelzés 54,2 f2 értékkel rendelkezett, ez azt mutatja, hogy a CNN képes önállóan felismerni az adatokban lévő mintákat. A bemutatott módszerek elősegíthetik a gyártási folyamatok jobb megértését, mivel a részletes információk gyors mérésekkel válnak elérhetővé.

Referenciák:

- [1] Zeng, Q.; Wang, L.; Wu, S.; Fang, G.; Zhao, M.; Li, Z.; Li, W.; *International Journal of Pharmaceutics*, **2022**, (625), 122100.
- [2] Galata, D.L.; Zsiros, B.; Mészáros, L.A.; Nagy, B.; Szabó, E.; Farkas, A.; Nagy, Z.K.; *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, **2022**, (212), 114661.
- [3] Horkovics-Kovats, S.; Galata, D.L.; Zlatoš, P.; Nagy, B.; Mészáros, L.A.; Nagy, Z.K.; *International Journal of Pharmaceutics*, **2022**, (617), 121624.
- [4] Nishii, T.; Matsuzaki, K.; Morita, S.; *International Journal of Pharmaceutics*, **2020**, (590), 119871.



DIKETONÁTO-SZILOL VEGYÜLETEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS ANALITIKAI VIZSGÁLATA – AZ ELSŐ SEMLEGES HEXAKOORDINÁLT SZILOL KOMPLEX

Szathmári Balázs¹, Holczbauer Tamás², Kovács Ilona¹, Kelemen Zsolt¹

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

²ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémia Intézet és Kémiai Krisztallográfiai Laboratórium, 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.

A szilícium hajlamos négyesnél magasabb, ötös [1], hatos [1], illetve akár hetes [2] koordinációjú vegyületek kialakítására, amelyek érdekes szerkezeti tulajdonságokat mutatnak. A szilícium koordinációs kémiában elterjedten használt ligandumok a kétfogú 1,3-diketonok, vagy másnéven β -diketonáto ligandumok. Az irodalomban megtalálhatóak egy, kettő, illetve három β -diketonáto ligandumot tartalmazó szilíciumkomplexek is [3]. Korábban a BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszéken már számos, a gyűrűben szubsztituált szilaciklopentadiént (szilolt) állítottak elő, és vizsgálták ezen vegyületek tulajdonságait [4]. Munkám során a szilícium koordinációs lehetőségeit vizsgáltam szilolok β -diketonáto ligandumokkal alkotott vegyületeiben. Kutatásom eredményeképpen számos új diketonáto-szilol vegyületet állítottam elő, és sikeresen szintetizáltam egy semleges hexakoordinált szilol komplexet, amely legjobb tudomásunk szerint az első ilyen típusú szilol komplex. Az előállított vegyületek szerkezetét ^1H -, ^{13}C -, ^{29}Si -, különböző korrelációs és alacsony hőmérsékletű NMR spektroszkópiai mérésekkel, IR spektroszkópiával és egykristály röntgendiffrakciós mérésekkel karakterizáltuk.

A gyakorlati munkát kvantumkémiai számításokkal egészítettük ki, amelyek segítségével feltérképeztük a reakciók lehetséges mechanizmusát, illetve megvizsgáltuk, hogy a szilolgyűrű, illetve diketonáto ligandum különböző szubsztituensei milyen hatással vannak a komplexképzési reakciókra.

Referenciák:

- [1] Tandura, S. N.; Voronkov, M. G.; Alekseev, N. V.; *Topics in Current Chemistry - Structural Chemistry of Boron and Silicon; Molecular and Electronic Structure of Penta- and Hexacoordinate Silicon Compounds*, **1986**, 99-189.
- [2] Kameo, H.; Kawamoto, T.; Sakaki, S.; Bourissou, D.; Nakazawa, H.; *Organometallics*, **2014**, (33), 6557-6567.
- [3] González-García, G.; Álvarez, E.; Gutiérrez, J. A.; *Polyhedron*, **2012**, (41), 127-133.
- [4] Szűcs, R.; Fekete, C.; Bombicz, P.; Rohonczy, J.; Kovács, I.; Nyulászi, L.; *European Journal of Inorganic Chemistry*, **2020**, (7), 656-664.

ALDEHIDEK BORÁNKATALIZÁLT REAKCIÓI

Györfi Sára^{1,2}, *Forman Ferenc*^{2,3}, *Soós Tibor*^{2,3}

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

²Eötvös Loránd Kutatási Hálózat Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet, Organokatalízis Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt. 2.

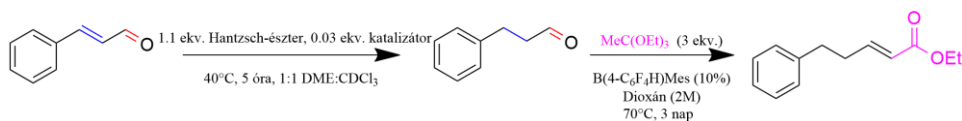
³Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar, 1117 Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A.

Kutató munkám során két újszerű borán katalizált aldehid átalakításon dolgoztam. Ezek közül az első egy szelektív redukció, ami a mai modern organokatalízis egy fontos kutatási területe. Ebben a reakcióban telítetlen aldehideket redukáltam Hantzsch-észterrel boránkatalizátor jelenlétében, és ezzel szelektíven telített aldehideket állítottam elő. A korábbi irodalomban számos cikk foglalkozott a témával, azonban ezek vagy fém katalizátor mellett [1,2,3], vagy korlátozott funkciós csoport toleranciával és középmagas katalizátor mennyiséggel működtek [4], ellenben a mi módszerünkkel, ami 0,3% katalizátor mennyiség mellett széleskörben működik szelektíven, fémmentes körülmények között.

Munkám során elsősorban a reakció körülményeinek optimalizálásával, a kiterjeszhetőség elkészítésével és a kiindulási aldehidek előállításával foglalkoztam.

A második reakcióként egy aldol kondenzációval foglalkoztam, ahol alifás aldehideket alakítottam át α,β -telítetlen észterekké aldehidek és ortoészterek kondenzációjával.

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 [5].



1.ábra: A munkám során vizsgált reakció

Referenciák:

- [1] Gao, Y., Wang, J., Han, A., Jaenicke, S., Chuah, G. K., *Catalysis Science and Technology*, **2016**, (6), 3806–3813.
- [2] Himeda, Y., Onozawa-Komatsuzaki, N., Miyazawa, S., Sugihara, H., Hirose, T., Kasuga, K., *Chemistry - A European Journal*, **2008**, (14), 11076–11081.
- [3] Song, T., Duan, Y., Yang, Y., *Catalysis Communications*, **2019**, (120), 80–85.
- [4] Yang, J. W., Hechavarria Fonseca, M. T., List, B., *Angewandte Chemie - International Edition*, **2004**, (43), 6660–6662.
- [5] Staudinger; Schneider, *Chemische Berichte*, **1923**, (56), 706.



AZ IONIZÁLÓ SUGÁRZÁSOK HATÁSA A TP53 DEFICIENS ZEBRAHAL EMBRIÓKRA

Németh Barnabás^{1,2}, Polanek Róbert², Annus Tamás¹, Dudás Júlia², Varga Máté¹, Szabó Emília Rita²

¹Eötvös Loránd Tudományegyetem, Genetikai Tanszék, Halgenetikai kutatócsoport, 1117 Budapest, Pázmány Péter stny. 1/C.

²ELI-ALPS Orvosbiológiai Alkalmazások csoport, 6728 Szeged, Wolfgang Sandner u. 3.

A különböző ionizáló sugárzások jól dokumentált DNS-károsító hatásnak számítanak. Az ilyen sugárzásnak való tartós kitettség súlyos következményekkel járhat egészségünkre, ezért fontos a sugárzás molekuláris, rövid és hosszú távú következményeinek tanulmányozása modellszervezetek segítségével. Két különböző zebrahal (*Danio rerio*) törzs, pharyngula periódusban levő embrióit, 250 keV-os röntgensugárzásnak tettük ki, majd ezt követően túlélési, kikelési és morfológiai elváltozás elemzést végeztünk. Kísérleteinkhez egy már jól tanulmányozott *tp53* deficiens törzset (*tp53^{M214K}*) használtunk, illetve kontrollként a vad típusú AB törzset. A *tp53* az egyik legfontosabb tumorszuppresszor fehérje, amely emberi rákos megbetegedésekben gyakran hordoz különböző mutációkat. Kulcsfontosságú szerepe van a sejtciklus és az apoptózis szabályozásában, a sejt életteni állapotától függően. Kis mérete, gyors egyedfejlődése és alacsony költségigénye miatt a zebrahal egy rendkívül jó modellszervezet viszonylag nagyszámú kísérlet elvégzésére, melyek során nagy mennyiségű, megbízható adat generálható, ezért ideális jelölt vizsgálatainkhoz. A vad típusú és *tp53* mutáns halembriókat és lárvákat négy napon keresztül figyeltük meg, miután különböző dózisu röntgenforrással kezeltük, és naponta mikroszkópos megfigyelés során rögzítettük túlélési arányukat és a különböző fellépő fejlődési rendellenességeket (a gerinc kóros görbületét és a szívburok ödéma megjelenését), amelyek a kezelés következtében keletkeztek.

Az általunk kifejlesztett kísérleti paradigma későbbiekben felhasználható lehet az ionizáló sugárzások más, a genom fenntartásában és a DNS-javításban is fontosnak tartott gének mutációira gyakorolt hatásainak vizsgálatára.



A DOHÁNYZÁS MUTAGÉN HATÁSÁNAK MODELLEZÉSE SEJTKULTÚRÁBAN

Engel Botond^{1,2}, Németh Eszter¹, Szüts Dávid¹

¹ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Enzimológiai Intézet, Budapest, 1117, Budapest,
Magyar tudósok krt. 2.

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, 1111 Budapest,
Műegyetem rkp. 3.

Kezdetben a 4-nitrokinolin 1-oxidot (4-NQO) a laboratóriumi gyakorlatban az UV-sugárzás mimikálására használták, később pedig a dohányzással összefüggő humán daganatokhoz hasonló egértumorok kiváltására. A 4-NQO két fő módon fejt ki mutagén hatását. Először is, metabolitja, a 4-hidroxiaminokinolin-1-oxid kovalens kötéseket képes kialakítani a DNS-sel. Ezen léziók fő javítási útvonala a nukleotid kivágó javító mechanizmus (NER). Másrészt a felszabaduló reaktív oxigénszármazékok (ROS) reakcióba lépnek a DNS bázisaival, elsősorban a guanin 8-as pozíciójában bekövetkező hidroxilációját okozva, amelyet elsősorban a báziskivágó javító mechanizmus (BER) javít.

A DNS-re gyakorolt különböző hatásai és a 4-NQO által kiváltott egértumorok esetében szerzett tapasztalatok alapján a 4-NQO alkalmas lehet a dohányzás mutagén hatását utánzó mutációs folyamatok vizsgálatára kontrollált sejtvonalkísérletekben.

A szer hatását két kiválasztott modellrendszerben, a humán TK6 és a csirke DT40 limfocita sejtvonalakon vizsgáltuk. Az előbbi előnye, hogy humán modell, az utóbbi pedig azért előnyös, mert számos olyan genotípus rendelkezésre áll, melyekben a különböző DNS-javítási útvonalak sérültek. Az egyes sejtvonalakra vonatkozó IC50 értékeket sejtleletkéességi vizsgálatokkal határoztuk meg. Az izogenikus sejtvonalakat négy héten keresztül tenyésztettük, és hetente egyszer 4-NQO-val kezeltük. A kezelt sejtpopulációkból egy sejt klónozást végeztünk, és minden sejtvonal esetén három mintából genomi DNS-t készítettünk. A szerre adott válaszként fellépő mutációkat teljes genom szekvenálással határoztuk meg. A mutációs spektrumot összehasonlítottuk a publikált adatokkal, megerősítve a dohányzás által kiváltott mutagenezissel való erős hasonlóságot. A hatás különböző modellrendszerekben történő összehasonlítása a 4-NQO által kiváltott mutagenezis mechanizmusának részleteit tárja fel.

Köszönetnyilvánítás: A munkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatta (PD_134818).



IZATINALAPÚ SPIROCIKLUSOK ÉS EGYÉB HETEROCIKLUSOK ELŐÁLLÍTÁSA

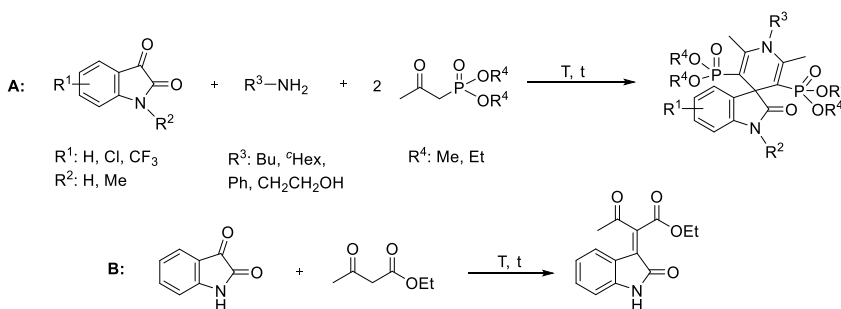
Németh Áron Soma¹, Rávai Bettina¹, Bálint Erika¹

¹Budapesti 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]. Az izatinalapú Knoevenagel-adduktok is további fontos prekursorok a különböző biológiailag aktív molekulák előállításában [2].

Kutatómunkám során egyrészt célul tűztük ki új, foszfonát szerkezeti egységet tartalmazó spirooxindol-dihidropiridinek előállítását változatos izatinokból, β -ketofoszfonátokból és primer aminokból kiindulva. Másrészt vizsgálni kívántuk az izatinok és különböző aktív metilén csoportot tartalmazó vegyületek (pl.: acetecetészter) Knoevenagel-kondenzációját is.

Első lépésben az izatinok, β -ketofoszfonátok és primer aminok Hantzsch-típusú reakcióját tanulmányoztuk különböző körülmények között (hőközlés, hőmérséklet, reakcióidő, mólarányok, katalizátorok), majd a reakciót további vegyületekre is kiterjesztettük. Az izatin és acetecetészter Knoevenagel-adduktjának képzése során különböző bázisok hatását vizsgálva kerestük az optimális körülményeket. A reakciók nyomon követését ³¹P NMR spektroszkópiával, valamint HPLC kromatográfiával végeztük.



1. ábra: A Hantzsch-típusú reakció (A) és a Knoevenagel-kondenzáció (B)

Referenciák:

- [1] Khorrami, A. R.; Kiani, P.; Bazgir, A., *Monatshefte Für Chemie*, **2011**, (142), 287-295.
 [2] Ferreira, J. M. G. de O.; da Silva, G. A.; Coelho, M. C.; L. Junior, C. G.; Vale, J. A., *Results in Chemistry*, **2021**, (3), 100135.



PER- ÉS POLISZULFIDOK ALKILÁLÁSI REAKCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA

Jurányi Eszter Petra^{1,2}, Ditrói Tamás¹, Galambos Klaudia^{1,3}, Nagy Péter^{1,4,5}

¹*Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológiai és Toxikológiai Osztály és Nemzeti Tumorbiológiai Laboratórium, 1122 Budapest, Ráth György u. 7-9.*

²*Semmelweis Egyetem, Molekuláris Orvostudományok Doktori Iskola, 1094 Budapest, Tűzoltó u. 37-47.*

³*Debreceni Egyetem, Laki Kálmán Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Nagyerdei krt. 98.*

⁴*Állatorvostudományi Egyetem, Anatómiai és Szövetani Tanszék, ELKH Redoxbiológiai Laboratórium, 1078 Budapest, István u. 2.*

⁵*Debreceni Egyetem, Kémiai Intézet, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.*

A Reaktív Kénszármazékok (RSS), ezen belül is a kis- és nagymolekula perszulfidok analitikai meghatározása kihívást jelent, mivel rendkívül kis koncentrációban találhatóak a sejtekben, bomlékonyak és reaktívak. Ám a sejten belüli, oxidatív stressz elleni védelemben betöltött és fehérje aktivitást befolyásoló szerepük miatt fontosak, így szükség van egy megbízható, robusztus és jól reprodukálható perszulfid detektálási módszerre.

A jelenleg publikált perszulfid mérési módszerek bár különböző mintaelőkészítési lépéseket tartalmaznak, ám mindegyikben közös, hogy alkilálási reakciót alkalmaznak az oxidációs állapotok befagyaszttására, a különböző alkilálószerrek pedig alapvetően befolyásolják a detektált specieszek eloszlását [1,2].

Célul tűztük ki, hogy a kutatócsoportunkban alkalmazott kis- és nagymolekula perszulfid detektálási módszert optimalizáljuk és azonosítsuk azokat a kritikus paramétereket, amelyek alapvetően befolyásolják a detektált mennyiségeket és az egyes részecskék eloszlását. Ehhez egy széles körben használt módszert vettünk alapul, amiben az alkilálás β -hidroxi-4-feniletil-jódoacetamid-dal (HPE-IAM) történik [3].

Eddigi munkánk során vizsgáltuk a sejt kultúrákon végzett mintaelőkészítéssel kapcsolatos befolyásoló faktorokat, mint a konfluencia, intakt sejten vagy lizátumban történő alkilálás és az alkilálószer citotoxicitása. Az analitikai módszer (HPLC-MS/MS) optimalizálását is elvégeztük, a kromatográfiai módszer esetében a gradiens módosításával növeltük a hatékonyságot és az érzékenységet.

A Projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatallal létrejött Támogatási Szerződés alapján valósult meg (Nemzeti Laboratóriumok Program - Nemzeti Tumorbiológiai Laboratórium (2022-2.1.1-NL-2022-00010) és Tématerületi Kiválósági Program (TKP2021-EGA-44).

Referenciák:

[1] Bogdándi; Virág et al; *British Journal of Pharmacology*, **2019**, 176(4), 646–70.

[2] Schilling; Danny et al; *Angewandte Chemie*, **2022**, (61), 30.

[3] Akaike; Takaaki et al.; *Nature communications*, **2017**, 8(1), 1177.



KITERJESZTETT n -RENDSZERŰ FLUOROGÉN NIR-II FESTÉKEK PREKURZORAINAK SZINTÉZISE

Ábrahám Eszter, Kern Dóra, Kormos Attila, Kele Péter
ELKH Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.

Az orvosi diagnosztikában és biológiai folyamatok nyomon követésekor kiválóan használhatóak a fluoreszcens jelzővegyületek. Az élő sejtben a háttér nélküli, szelektív jelzést bekapcsolható fluoreszcenciájú, fluorogén molekulákkal lehet biztosítani, amelyek egy kiváltó hatás eredményeként aktív, fluoreszcens állapotba kerülnek. A fluorogenicitást el lehet érni például fenolát donorú push-pull festékek fenolos hidroxicsoportjának szubsztitúciójával, ekkor a szubsztituens jelenlétében nem tapasztalható emisszió. A szubsztituens eltávolításával, ami általában rendszerspecifikus molekulák jelenlétéhez vagy hatásához köthető, a fluoreszcencia újra detektálható lesz. Az autofluoreszcencia kiküszöböléséhez, azaz a megfelelő jel-zaj arány eléréséhez lehetőség van nagyobb Stokes-eltolódású, vagy hosszabb hullámhosszú fényrel gerjeszthető festékek alkalmazására. A SWIR (*short wave infra red*) tartományban gerjeszthető festékek előnye, hogy a besugárzó fény mélyen behatol a szövetekbe, de nem károsítja azokat.

Munkám során olyan SWIR tartományú fényrel gerjeszthető festékek prekursorainak szintézisével foglalkoztam, amelyek alkalmasak lehetnek rákos sejtek szelektív jelölésére. A fluorogenicitást úgy terveztem elérni, hogy a rákos sejtekben túlzott expressziót mutató alkáli foszfátáz (ALP) enzim szubsztrátjával szerettem volna szubsztituálni [1] a festékek fenolos hidroxilcsoportját. A jelzővegyület emissziója tehát megnő az enzimhatás következtében. A festékvázak két kromenilium egységet tartalmaznak, melyeket polimetin láncsal terveztem összekötni [2]. Számos prekuzort sikeresen előállítottam már, bár a végtermékek szintézisét még nem végeztem el. Az elvégzett optimalizálási kísérletek alapján azonban ezek előállítása potenciálisan sikeres lesz.

Referenciák:

- [1] W. Chyan; R. T. Raines; *ACS Chemical Biology*, **2018**, (13), 1810–1823.
- [2] E. D. Cosco; B. A. Arús; A. L. Spearman; T. L. Atallah; I. Lim; O. S. Leland; J. R. Caram; T. S. Bischof; O. T. Bruns; E. M. Sletten; *Journal of the American Chemical Society*, **2021**, (143), 6836–6846.



MACSKAMENTA KEVERTETÉSES EXTRAKCIÓJÁNAK OPTIMALIZÁLÁSA, AZ EXTRAKTUM ÖSSZETÉTELÉNEK ANALITIKAI VIZSGÁLATA

Balogh Marcell János, Vági Erika Mária

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Környezeti Kémiai és Folyamatmérnöki Tanszék, 1111 Budapest, Bertalan Lajos u. 4-6.*

Az extrakciós technológiák költségigényének jelentős része magához az extrakciós lépéshez köthető, így elengedhetetlen megismerni a folyamat kinetikáját és a termék minőségét befolyásoló tényezők hatását a hozamra.

A macskamenta (*Nepeta cataria*) gyógynövényként való felhasználása több évszázados múltra tekint vissza a népi gyógyászatban, ugyanis széleskörű farmakológiai hatással bír (antidepresszáns, lázcsillapító, görcsoldó hatású) [1]. Intenzíven kutatott terület a rovarriasztó hatása, amivel a szintetikus vegyszer alapú rovarűző szereket ki lehetne váltani [2]. Az macskamenta előnyös farmakológiai tulajdonságait illóolajai okozzák, elsősorban a a nepetalakton tartalma, amely az iridoid típusú monoterpének csoportjába tartozik, de jelentős mennyiségben tartalmaz flavonoidokat, polifenolos vegyületeket, tanninokat és szteroidokat egyaránt [3].

Munkám során macskamenta kevertetéses extrakciójának optimalizálását végeztem laboratóriumi körülmények között. Felderítettem a folyamat kinetikáját különböző extrakciós idők, valamint különböző összetételű etanol-víz elegyek alkalmazásával, továbbá vizsgáltam az oldószer víztartalmának és az extrakció idejének hatását az extrakciós hozamra nézve 3^2 kísérletterv segítségével. Mindezek mellett tanulmányoztam a változó paraméterek hatását a kivonatok összpolicenol-tartalmára, és műszeres analitikai módszerek segítségével összehasonlítottam a különböző extraktumok bioaktív komponenseinek mennyiségi változását.

Az általam alkalmazott beállítások mellett leggyorsabb és leghatékonyabb extrakciót 40% és 70% etanollal végezhetünk. Összpolicenol-tartalom méréseim jó egyezést mutatnak az irodalomban talált eredményekkel, kevesebb oldószer felhasználása mellett.

Referenciák:

- [1] Sharma, A.; Nayik, G. A.; Cannoo, D. S.; *Plant and Human Health: Pharmacology and Therapeutic Uses*, **2019**, (3), 285–299.
- [2] Schultz, G.; Simbro, E.; Belden, J.; Zhu, J.; Coats, J.; *Environmental Entomology*, **2004**, 33(6), 1562–1569.
- [3] Sharma, A.; Cooper, R.; Bhardwaj, G.; Cannoo, D. S.; *Journal of Ethnopharmacology*, **2021**, 268.



TABLETTÁZÁSI HIBÁK VALÓS IDEJŰ FELISMERÉSE MESTERSÉGES INTELLIGENCIÁVAL

Diószegi Anna, Ficzer Máté, Galata Dorián László

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

A tablettázás egy olyan gyógyszeripari művelet, mely a termék végső formájának kialakításában kulcsfontosságú szerepet játszik. A különböző, például beállításbeli vagy anyagi minőségből fakadó okok miatt gyakran hibás tabletták készülnek, melyek eltávolítása jelenleg nem megvalósítható hiánytalanul. Ezen tabletták felismerése és kiválogatása csökkentheti a filmbevonás során keletkező hibákat, így biztonságosabb készítmények gyárthatók a páciensek számára.

Munkám célja a futószalagon elhaladó tabletták valós időben történő teljes átvizsgálásának megvalósítása volt. Továbbá azt is meg szerettem volna vizsgálni, hogy különböző méretű és eltérő préserő alkalmazásával készült tabletták vizsgálatára is alkalmas lehet-e egy ilyen rendszer. Ennek tanulmányozásához kétféle átmérőjű tablettákat készítettem. Ezután valós tablettázási hibákat modellező sérüléseket hoztam létre a tablettákon. Ezt követően összeállítottam egy mérési elrendezést, ahol a futószalagon elhaladó tablettákról készítettem felvételeket. A kapott képeket felhasználva tanítottam a YOLOv5 konvolúciós neurális hálót. A betanított modell validálására új tablettákat készítettem, ezeket összekeverve a futószalagon eloszlattam és egy valós idejű videófelvételt készítettem.

Eredményeim azt mutatták, hogy a gépi látást és mesterséges intelligenciát is alkalmazó rendszer képes volt nagy pontossággal a tablettázási hibák felismerésére. Ezzel az elkészült tabletták 100%-os átvizsgálása megvalósítható, így jelentősen javítható a gyógyszeripari minőségbiztosítás hatékonysága.



RSK AKTIVITÁS TANULMÁNYOZÁSÁRA ALKALMAS KÍSÉRLETI RENDSZER KIDOLGOZÁSA ÉS ALKALMAZÁSA

Dénes Laura, Alexa Anita, Póti Ádám, Reményi Attila

*ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet,
Biomolekuláris Kölcsönhatások Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.*

A jelátviteli útvonalak a sejtek szabályzásában fontos szerepet betöltő információs hálózatok, amelyek a fehérjék közti kölcsönhatások által továbbítják a sejten kívülről érkező jeleket a belső célpont felé, aminek következtében a sejt működése módosulhat. Az egyik ilyen útvonal a MAPK-kaszád, amelynek a résztvevői a Raf kinázon át az ERK-ig szekvenciálisan aktiválják egymást. Az ERK egyik szubsztrátja az RSK fehérje, amely fontos szerepet tölt be a sejt működésében, többek közt génexpresszió, apoptózis szabályzás és proliferáció tekintetében. A Sos1 fehérje az egyik ismert RSK szubsztrát, és az általa történő foszforilációját követően a Sos1 a 14-3-3 ϵ fehérjéhez köt, ami az RSK-t aktiváló Raf-MEK-ERK jelpályára negatívan visszahat [1]. Az RSK és Sos1 fehérje kölcsönhatásában szerepe van egy újonnan felismert VF-motívumnak, amely kihasználható specifikus inhibitorok tervezésére [2].

Az előadásomban egy fehérje fragmens komplementáción alapuló RSK enzim aktivitás mérésére alkalmas szenzor tervezését, optimalizálását és inhibitor könyvtárakon való tesztelését mutatom be. A módszer alapja az, hogy a NanoBit rendszer luciferáz fragmensei Sos1 és 14-3-3 fehérjékkel vannak fuzionáltatva, amelyek közt az interakció az RSK foszforilációs eseményt követően történik meg. Ennek a három fehérjének a kölcsönhatásait kihasználva terveztem meg a szenzort, előállítottam a rendszer komponenseit bakteriális expressziós rendszerben és *in vitro* mérésekkel optimalizáltam a mérési körülményeket, majd a szenzort alkalmaztam a VF-motívum feltérképezésében illetve inhibitor könyvtárak tesztelésében.

Referenciák:

- [1]. Saha, M.; Carriere, A.; Cheerathodi, M.; Zhang, X.; Lavoie, G.; Rush, J.; Roux, P. P.; Ballif, B. A; *Biochemical Journal*, **2012**, 447(1), 159–166.
[2]. Alexa, A.; Sok, P.; Gross, F.; Albert, K.; Kobori, E.; Póti, Á. L.; Gógl, G.; Bento, I.; Kuang, E.; Taylor, S. S.; Zhu, F.; Ciliberto, A.; Reményi, A. *Nature Communications*, **2022**, 13(1), 472.



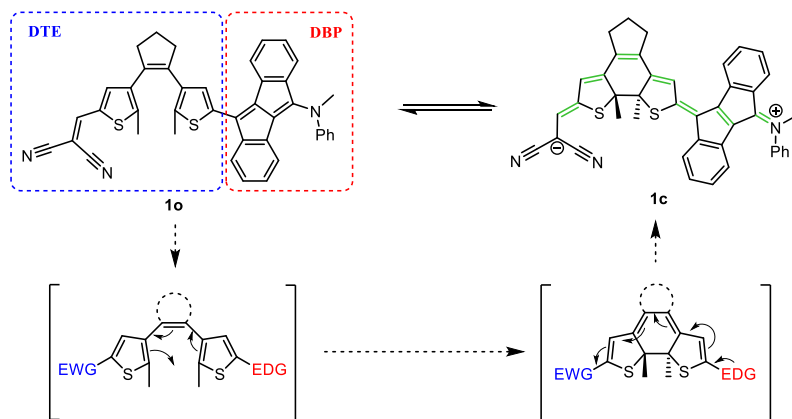
DITIENILETÉN KONJUGÁLT DIBENZOPENTALÉN RENDSZER SZINTÉZISE MOLEKULÁRIS ELEKTRONIKAI FELHASZNÁLÁSRA

Bogner Marcell, Kalapos Péter Pál, Mayer Péter, London Gábor

ELKH Természettudományi Kutatói Központ,

MTA TTK „Lendület” Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.

A napjainkban használt tranzisztorok analógiájára terveztünk és állítottunk elő egy új, potenciális unimolekuláris egyenirányító rendszert. Az általunk javasolt rendszerben egy elektronszívó csoportot tartalmazó ditiéniletén (DTE) kapcsolót kötöttünk össze egy elektronküldő csoporttal funkcionizált dibenzo[a,e]pentalén (DBP) szerkezettel. Elméleti kémiai számításaink alapján, a molekulában (1) létrejövő elektronszerkezet, konjugációs mintázata a fotokapcsoló részlet működésén keresztül jelentősen befolyásolható. Fotokapcsolás hatására várhatóan csökkenni fog a dibenzo[a,e]pentalén részlet antiaromás karaktere a periférián megtalálható elektronküldő és elektronszívó csoportok között kialakuló elektronikus kommunikáció miatt. Kutatásunk során sikerrel szintetizáltuk a célmolekulát (1, 1.ábra), így lehetőségünk nyílt a rendszer általános szerkezeti és fotokémiai vizsgálatára is.



1. ábra: Ditiéniletén kapcsoló izomerizációja, illetve a tárgyalt célmolekula. (EWG= elektronszívó csoport, EDG= elektronküldő csoport)

Referenciák:

- [1] Fuentes, N.; Martín-Lasanta, A.; Álvarez de Cienfuegos, L.; Ribagorda, M.; Parra, A.; Cuerva, J.; *Nanoscale*, **2011**, (3), 4003-4014.
- [2] Irie, M.; Fukaminato, T.; Matsuda, K.; Kobatake, S.; *Chemical Reviews*, **2014**, (114), 12174-12277.
- [3] Kawase, T.; Fujiwara, T.; Kitamura, C.; Konishi, A.; Hirao, Y.; Matsumoto, K.; Kurata, H.; Kubo, T.; Shinamura, S.; Mori, H. et al.; *Angewandte Chemie International Edition*, **2010**, (122), 7894-7898.

POLIKARBONÁT METANOLÍZISE VISSZAFORGATHATÓ KATALIZÁTORRAL ÉS ANNAK OPTIMALIZÁLÁSA

Németh Réka, Fehér Zsuzsanna, Kiss Johanna, Kupai József

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

A poli(biszfenol-A-karbonát) (BPA-PC) egy napjainkban gyakran alkalmazott hőre lágyuló műszaki műanyag, mely adathordozók (CD-k, DVD-k), védőszemüvegek, építőipari panelek alapanyagaként szolgálhat köszönhetően kiváló optikai tulajdonságainak, hő- és ütésállóságának. Az irodalomban ismert újrashasznosítási módszerek közül a kémiai lebontást választva a biszfenol A (BPA) monomer regenerálható, amely a későbbiekben újra felhasználható polimerszintézisben.

Kutatómunkám során a BPA-PC metanolízissel BPA monomerre történő bontását vizsgáltam, oldószerként a depolimerizációs reakcióban is keletkező dimetil-karbonátot (DMK) választva. Katalizátorként a csoportunkban előállított, 1,5,7-triazabiciklo[4.4.0]dec-5-énnel (TBD) módosított szilikagélhez rögzített organokatalizátor használtam. Előzetes paramétervizsgálatok (katalizátor:BPA-PC mólárány, MeOH:BPA-PC mólárány, hőmérséklet) alapján kísérlettervet állítottam fel a metanolízis optimalizálására. Továbbá az alkalmazott heterogén katalizátor visszaforgatását terveztem megvalósítani.



1. ábra: A BPA-PC metanolízisének reakcióegyenlete

A Richter Gedeon Talentum Alapítvány PhD ösztöndíjának, az OTKA (FK138037), valamint a Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-2-II-BME-161 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Referenciák:

- [1] Quaranta, E.; Sgherza, D.; Tartaro, G.; *Green Chemistry*, **2017**, (19), 5422–5434.
- [2] Kim, J. G.; *Polymer Chemistry*, **2020**, (11), 4830–4849.



ELŐÁLLÍTHATÓK 2-FOSZFAANILINEK [R-NCP]⁻ ANIONOK DIELS-ALDER REAKCIÓIVAL? – SZÁMÍTÁSOS KÉMIA VIZSGÁLATOK

Horváth Ádám, Benkő Zoltán

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.*

Az utóbbi néhány évtizedben a foszforkémia, különösen az alacsony koordinációjú foszforvegyületek kémiája intenzíven kutatott területté vált. Ennek köszönhetően számos érdekes tulajdonsággal rendelkező és a gyakorlatban alkalmazható vegyületet állítottak elő. Ezen vegyületek egyike a cianát, [NCO]⁻ anion P-analógja, a foszfaetinolát [PCO]⁻ anion, ami előszeretettel vesz részt cikloaddíciókban, melyek közül különösen érdekesek Diels-Alder reakciói. Az elmúlt években a [PCO]⁻ anion további „nehezebb” származékait is sikeresen szintetizálták, melyek így általánosan az [ECX]⁻ képlettel jellemezhetők (E: P, As, X: O, S, Se). Korábbi munkánk során megállapítottuk, hogy ezek a nehezebb származékok is potenciális dienofilek lehetnek Diels-Alder reakciókban, illetve, hogy a kalkogén atom változtatásával hangolható az egyes anionok reaktivitása.

Azonban a kalkogén atomok száma limitált, ezért felmerült az igény olyan analóg anionok keresésére, melyek tartalmazzák az 'E≡C' egységet, de az X-csoport helyén nagyobb hangolhatósággal rendelkező csoportot tartalmaznak. Irodalmi adatok alapján korábban már sikerült előállítani ún. [R-N=C=P]⁻ anionokat, ahol pl.: R: 'Pr, CN, azonban a nitrogénen lévő R csoport nagyobb változatosságot is lehetővé tesz. Előadásom során néhány kiválasztott példán bemutatom az [R-N=C=P]⁻ anion 2-piranonnal szembeni cikloaddíciós reaktivitását, illetve becslést adok az egyes reakciók kísérleti megvalósíthatóságára is.

Az előadás elkészítéséhez az NTP-HHTDK kódszámú pályázat anyagi forrást biztosított.

A munka az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-22-2-I-BME-139 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.



AZ RGS3 FEHÉRJE ÉS AZ ONKOGEN KRAS MUTÁNSOK KÖLCSÖNHATÁSÁNAK VIZSGÁLATA

Emődi Nikolett, Nyíri Kinga

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.*

A daganatos megbetegedések kialakulásának egyik fő oka a Ras génben fellépő, funkcióvesztéssel járó mutáció. A jelátviteli útvonalak szabályozásában kiemelkedő szerepe van a Ras fehérjecsald tagjainak, ezen belül is a KRas fehérjéknek. Ezen enzimek GTPáz aktivitása felel a GTP GDP-vé történő átalakításáért. GTP-kötött állapotában a fehérje képes a jel továbbítására, GDP-kötött állapotában viszont inaktív. Annak érdekében, hogy az inaktiváció megfelelő sebességgel lejártszódjon a KRas-hoz kapcsolódó GAP (GTPase activating protein) fehérjék gyorsítják a GTP hidrolízist. Azonban a KRas fehérje mutációjának hatására a segédfehérjékkel való kölcsönhatás legyengül, ami a GTPáz aktivitásának csökkenését is okozza. Ennek eredményeként pedig a fehérje nem tudja ellátni a jelátviteli hálózatban betöltött szerepét, ami a sejtek proliferációs és osztódással kapcsolatos folyamatainak sérüléséhez, így daganatok kialakulásához vezet.

Felmerülhet a kérdés, hogy van-e lehetőség a jelátviteli útvonalak szabályozásának visszaállítására, azaz a KRas mutánsok aktivitásának növelésére. A közelmúltban vizsgálták az RGS3 fehérje hatását az egyik leggyakrabban előforduló KRas mutánsra (G12C), aminek eredményeként azt találták, hogy az RGS3 képes volt katalitikus hatást kifejteni a KRas G12C-re [1]. Ebből adódóan az RGS3 fehérjének a pontosabb megismerése elősegítheti a daganatterápiás módszerek fejlődését.

Kutatásunk célja, hogy a KRas G12C és G12D mutánsokat aktiválni képes RGS3 fehérje hatását vizsgáljuk. A két fehérje kötődésének erőssége jelenleg még ismeretlen, ezért bioréteg interferometriás (BLI) módszerrel kívánjuk nyomon követni a fehérjék közti kölcsönhatást, valamint kvantitatív adatokat szolgáltatni róla. Emellett MESG-PNP enzimaktivitásmérő módszerrel vizsgálni szeretnénk azt is, hogy az RGS3 aktív centrumát magába foglaló kristályosítható domén szintén képes-e a KRas mutánsok aktiválására.

Referenciák:

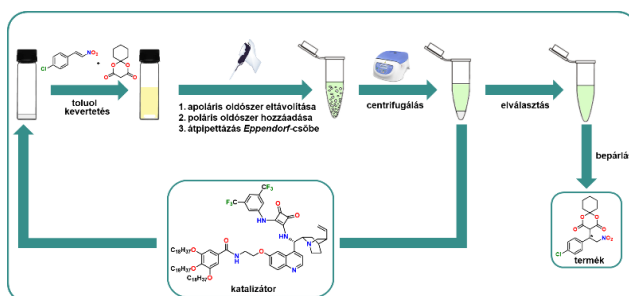
[1] Li, C.; Vides, A., Kim, D.; Xue, J. Y.; Zhao, Y.; Lito, P.; *Science*, **2021**, (374), 197-201.



LIPOFIL CINKONA-NÉGYZETAMID ORGANOKATALIZÁTOR VISSZAFORGATÁSA ÉS FELHASZNÁLÁSA A BAKLOFEN KIRÁLIS INTERMEDIERJÉNEK ELŐÁLLÍTÁSÁRA

Erdélyi Dóra, Dargó Gyula, Molnár Balázs, Bagi Péter, Kisszékelyi Péter, Kupai József
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szerves Kémia és Technológia Tanszék. 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Az elmúlt néhány évtizedben kiemelkedően fontos szerepet kapott az enantiomertiszta gyógyszerhatóanyagok előállítása, melyek előállíthatók királis katalizátorok jelenlétében, enantioszelektív reakciókban. Kutatómunkám során egy cinkona-négyzetamid típusú organokatalizátort állítottam elő, majd egy *linkeren* keresztül – a visszaforgatásának megkönnyítése érdekében – lipofil egységként oktadecil láncokkal szubsztituált galluszsav-származékot kapcsoltam hozzá. A katalizátorral homogén katalízist valósítottam meg konjugált addíciós reakciókban, melyek között szerepelt a görcsoldó hatású baklofen királis intermedierjének előállítása is. A katalizátor visszaforgatását oldószercserével valósítottam meg, kihasználva a komponensek eltérő oldhatóságát (1. ábra). Így a katalizátort 5 reakcióciklusban alkalmaztam a termelés (94–100%) és az enantiomerfelesleg (92–94% ee) szignifikáns változása nélkül, minimális katalizátorvesztés mellett.



1. ábra: Lipofil organokatalizátor visszaforgatása a baklofen előállításánál

A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-3-I-BME-125 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA-FK 138037), valamint Richter Gedeon Talentum Alapítvány anyagi támogatásával készült.

Referenciák:

- [1] Jichu, T.; Inokuma, T.; Aihara, K.; Kohiki, T.; Nishida, K.; Shigenaga, A.; Yamada, K.-I.; Otaka, A.; *ChemCatChem*, **2018**, (10), 3402–3405.



GYÓGYSZERHATÓANYAGOK BIOMIMETIKUS OXIDÁCIÓS ÚTVONALAINAK ÁTFOGÓ, ELEMZŐ VIZSGÁLATA

Mohácsi Zsombor Márton¹, Decsi Balázs², Balogh-Weiser Diána², Balogh György Tibor^{1,3}

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, 1111 Budapest, Bertalan Lajos u. 4-6.

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológiai Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

³Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszertudományi Kar, Gyógyszerhatástani és Biofarmáciai Intézet, 6720 Szeged, Eötvös u. 6.

A gyógyszerkutatás korai fázisához kapcsolódóan kiemelt feladat a hatóanyagok májhoz köthető metabolizmusának vizsgálata és a képződő metabolitok azonosítása, az egyes major metabolitok előállításának vizsgálata. A korai vizsgálatok fő célja azon hatóanyagjelöltek azonosítása, melyek metabolizmusa fokozott és/vagy toxikus termékek képződéséhez vezet. Így a metabolikus stabilitás mellett a reaktív metabolitok képződése áll a gyógyszerjelöltek szerkezeti optimalizációs stratégiájának fókuszában.

A metabolizmus vizsgálatok kiindulópontját hagyományosan az *in vitro* máj mikroszómális (endoplazmatikus retikulum) rendszerek jelentik, melyek fő összetevője a gyógyszerek fázis I oxidációjáért elsődlegesen felelős citokróm P450 izoenzimek. Az enzimsalád aktív centruma egy protoporfirin IX egység, melynek oxidációs mechanizmusa jól modellezhető szintetikus metalloporfirin származékokkal. A metalloporfirinek több oxidációs mechanizmusa ismert, ami elsődlegesen a közeg pH értékének függvényében változik és így a biomimetikus folyamaton túl specifikus oxidatív átalakulásra is lehetőséget ad a gyógyszerkémikus számára.

Munkám során szerkezetileg diverz hatóanyagok átalakulását vizsgáltam porfirinyűrű mezo helyzetében p-szulfoniloxifenil-csoportokat tartalmazó, kereskedelmi forgalomban kapható szintetikus vasporfirinnel, három különböző pH-n (pH = 2,7; 4,5 és 7,4), terc-butilhidroperoxid (tBuOOH) oxidálószer jelenlétében. A biomimetikus átalakulás mértékét, illetve a keletkező metabolitokat HPLC-MS módszerrel vizsgáltam. Ennek megfelelően a vegyületek biomimetikus oxidációját a konverzióval, a metabolitok számával és a metabolitok szerkezetét MS, HR-MS alapján kapott tömegváltozás, esetenként referencia metabolitok segítségével jellemeztem.



POLI(ETILÉN-TEREFTALÁT) VISSZAFORGATHATÓ ORGANOKATALIZÁTOROKKAL TÖRTÉNŐ GLIKOLÍZISÉNEK MÉRETNÖVELÉSE

Kiss Johanna, Fehér Zsuzsanna, Kupai József

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

A poli(etilén-tereftalát) (PET) egy széles körben, főként csomagoláshoz felhasznált, biológiailag nehezen lebomló polimer, így nagymértékben hozzájárul a Földünk szennyezéséhez. A kutatási munkánk során hulladék PET-palackból készült örlemény bisz(2-hidroxietyl)-tereftalát (BHET) monomerré történő depolimerizációját valósítottuk meg.

Korábban sikeresen optimalizáltuk a PET szilikagélhez rögzített szerves bázisok által katalizált glikolízisét kis reakcióméretben (384 mg PET), mely eredményeképpen 89%-os BHET-termelést sikerült elérnünk. A munkánk folytatásaként a reakció meretnövelését vizsgáltuk. Kiindulási anyagként 5 g PET-palackból készült örleményt használtunk, katalizátorként pedig a kereskedelmi forgalomban kapható trialkil-aminnal módosított szilikagélt (Si-TEA), egy általunk előállított, 1,5,7-triazabicyclo[4.4.0]dec-5-énnel (TBD) módosított szilikagélt, illetve kisebb katalitikus aktivitással rendelkező módosítatlan szilikagélt alkalmaztunk. A módosítatlan szilikagél esetében egy 2^3 kétszintes faktortervet dolgoztunk ki. A vizsgált faktoroknak a hőmérsékletet (180–190 °C), a katalizátor/PET tömegarányt (25–50 m/m%) és az etilén-glikol/PET molarányt (15–20 ekv.) választottuk, a reakcióidőt pedig 5 órára rögzítettük. A trialkil-aminnal funkcionizált szilikagél alkalmazása során a módosítatlan szilikagéllel végzett kísérletterv eredményei alapján egy 2^2 teljes faktoros tervet állítottunk fel, a hőmérséklet (180–190 °C) és a katalizátor/PET molarány (5–10 mol%) hatását vizsgálva. Az oldószer szerepét is betöltő etilén-glikol mennyiségét ebben az esetben 15 ekvivalensnek, a reakcióidőt pedig 4 órára választottuk. Az optimális reakciókörülményeket mindkét esetben BHET-termelésre felállított modellből Box–Wilson-féle gradiens módszer segítségével határoztuk meg. A reakció optimális körülményei között kiváló BHET-termelést tudtunk elérni. Továbbá tervezzük a katalizátorok minél több ciklusban történő visszaforgatását is.

A kutatás a Magyar Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-22-2-I-BME-146 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (kódszám: FK138037) és a Richter Talentum Alapítvány anyagi támogatásával valósult meg.

SZCINTILLÁCIÓS KOKTÉL HULLADÉKOK SZILÁRDÍTÁSI LEHETŐSÉGEI

Baranyi Attila¹, Kopecskó Katalin²

¹MVM Paksi Atomerőmű Zrt., Radioaktív Hulladékkezelési Osztály, 7031 Paks, Pf. 71,

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Építőmérnöki kar, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A radioaktív oldatokban lévő, elsősorban kis energiájú alfa és béta sugárzó izotópok széles körben elterjedt laboratóriumi mérési módszere a folyadékszintillációs spektroszkópia (LSC). Mivel a módszer során alkalmazott szcintillációs koktélok szerves oldószerek, az LSC vizsgálatok rendszerint folyékony szerves radioaktív hulladékok keletkezésével járnak, amelyek elhelyezése és kezelése nagy nehézséget jelent. A leginkább elterjedt és hatékony kezelési módszer a szerves hulladékok égetése, amely költséges és körülményes megoldás. Egy másik, egyszerűbb és olcsóbb módja lehet ezen hulladékok biztonságos tárolásának a hulladékok cementbe vagy geopolimerbe ágyazása.

A kísérleteink célja, hogy találjunk egy általánosan használható receptúrát, amellyel az ismeretlen összetételű szcintillációs koktél hulladékok szilárdíthatók. Olyan módszert kellett kifejleszteni, amely egyszerűen kivitelezhető, ugyanakkor a szilárdított termék megfelel a Nemzeti Radioaktív Hulladék-tároló hulladék átvételi követelményeinek is.

Referenciák:

- [1] Abdel Rahman, R. O.; Ibrahim, H. A.; Hung, Y. T.; *Water*, **2011**, (3), 551-565.
- [2] Ojovan, M. I., ed.; *Handbook of Advanced Radioactive Waste Conditioning Technologies*, **2011**.
- [3] Dellamano, J. C.; Instituto de Pesquisas Energeticas e Nucleares, Brasil, **1988**.
- [4] Kelley, D.; *Proceedings of the 2017 25th International Conference on Nuclear Engineering*, ICONE25-66081, **2017**.
- [5] Dianu, M.; Podinã, C.; *Revue Roumaine de Chimie*, **2007**, 52(5), 509-519.
- [6] Eskander, S. B.; Abdel Aziz, S. M.; El-Didamony, H.; Sayed, M. I.; *Journal of Hazardous Materials*, **2011**, (190), 969-979.
- [7] Eskander, S. B.; Bayoumi, T. A.; Saleh, H. M.; *Progress in Nuclear Energy*, **2013**, (67), 1-6.
- [8] Bayoumi, T. A.; Saleh, H. A.; Eskander, S. B.; *Monatshfte für Chemie*, **2013**, (144), 1751-1758.
- [9] El-Didamony, H.; Bayoumi, T. A.; Sayed, M. I.; *International Scholarly Research Notices*, **2012**, (122), 1-11.
- [10] Reeb, C.; Pierlot, C.; Davy, C.; Lambertin, D.; *Ceramics International*, **2021**, 47(6), 7369-7385.
- [11] Radioaktív Hulladékokat Kezelő Kft.; *NRHT üzemeltetést megalapozó biztonsági jelentés (RHK-K-076B/16)*, **2018**, 11. fejezet.
- [12] Radioaktív Hulladékokat Kezelő Közhasznú Nonprofit Kft.; *A püspökszilágyi Radioaktív Hulladék Feldolgozó és Tároló hulladékvételi követelményei*, Határozat sz.: RHKR-HA0010
- [13] IAEA; TECDOC-560, **1990**.
- [14] IAEA; TECDOC-656, **1992**.
- [15] IAEA; TECDOC-929, **1997**.



EGY ÚJ, ALTERNATÍV OLDÓSZER SZINTÉZISE ÉS ALKALMAZÁSA

Kis Dávid¹, Dargó Gyula¹, Székely György², Kupai József¹

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

²King Abdullah University of Science and Technology, Physical Science and Engineering Division,
Advanced Membranes and Porous Materials Center, 23955-6900 Thuwal, Száúd-Arábia

A vegyiparban számos területen alkalmaznak oldószereket. Oldószereket használhatnak reakcióközegként a reagensek oldására, valamint a termékek elválasztása és tisztítása során is. Jelentős oldószerszámítást jelent a gyógyszeripar, ahol az ipari eljárások során a felhasznált anyagok tömegének akár 90%-a is oldószerekből származhat [1].

A környezetvédelmi előírások szigorodásával egyre nagyobb figyelmet kapnak az alternatív oldószerek, amelyek előnyös tulajdonságaik révén képesek lehetnek kiváltani a hagyományos, jelentős környezetkárosító hatással bíró, illetve tűzveszélyes szerves oldószereket. Általában alacsony a tenziójuk, így kisebb a légkörbe való kikerülésük valószínűsége, nem mérgezőek, nem gyúlékonyak és számos esetben biomassza-alapú forrásból vagy vegyipari melléktermékekből előállíthatók [2].

Munkám során célom volt egy, a fent említett előnyös tulajdonságokkal bíró alternatív oldószert előállítása több különböző, lehetőleg környezetbarát módszerrel. A kutatómunkám során sikeresen meghatároztam az oldószert legfontosabb fizikai tulajdonságait, például az olvadás- és fagyáspontját, sűrűségét valamint viszkozitását, illetve vizsgálatokat végeztem az oldószert stabilitására vonatkozóan. Az előállított oldószert sikeresen alkalmaztam olyan szén-szén kapcsolási reakciókban, mint a *Suzuki*- és a *Sonogashira*-reakció, illetve az aszimmetrikus *Michael*-addíció. Továbbá kiváló oldószernek bizonyult tiokarbamid típusú aszimmetrikus organokatalizátorok szintézise és polimerek lebontása során is.

A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-2-II-BME-145 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA-FK 138037), valamint Richter Gedeon Talentum Alapítvány anyagi támogatásával készült.

Referenciák:

[1] Constable, D. J. C.; Jimenez-Gonzalez, C.; Henderson, R. K.; *Organic Process Research & Development*, **2007**, (11), 133–137.

[2] Alder, C. M.; Hayler, J. D.; Henderson, R. K.; Redman, A. M.; Shukla, L.; Shuster, L. E.; Sneddon, H. F.; *Green Chemistry*, **2016**, (18), 3879–3890.



**ABSTRACTS OF
STUDENT
PRESENTATIONS**



THE EFFECT OF CELLULOSE FIBRE LENGTH ON THE EFFICIENCY OF A FLAME RETARDANT SYSTEM IN POLY(LACTIC ACID)

Kata Enikő Decsov, Bettina Ötvös, Thuy Tien Thanh Nguyen, Katalin Bocz, Budapest University of Technology and Economics, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Department of Organic Chemistry and Technology, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

In the flame retardancy of the biopolymer matrix and natural fibre reinforcement containing green composites, researchers face multiple challenges, such as low thermal stability, the candlewick effect of fibres and compatibility issues. Cellulosic fibres have been shown to have char-promoting properties and to advantageously interact with intumescent systems. In this work, melamine-polyphosphate was combined with neat or flame-retardant-treated cellulosic fibres differing in fibre length to obtain intumescent flame retarded poly(lactic acid) composites. The effect of the cellulose fibre length was evaluated in both forms. The structure-property relationships were evaluated by thermal and flammability test methods. It was found that the formation and the structure of the fire-protecting char are influenced by the length of the cellulose fibres, and thus it noticeably affects the effectiveness of the flame-retardant system. Cellulose fibres with an average length of 30–60 μm were found to contribute the best to the formation of an integrated fibrous-intumescent char structure with enhanced barrier characteristics.

References:

- [1] Decsov, K.E.; Ötvös, B.; Nguyen, T.T.T.; Bocz, K.; *Fire*, **2023**, (6), 97.



POSZTERSZEKCIÓ KIVONATAI



AZ RGS3 FEHÉRJE ÉS AZ ONKOGÉN KRAS MUTÁNSOK KÖLCSÖNHATÁSÁNAK VIZSGÁLATA

Emődi Nikolett, Nyíri Kinga

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.*

A daganatos megbetegedések kialakulásának egyik fő oka a Ras génben fellépő, funkcióvesztéssel járó mutáció. A jelátviteli útvonalak szabályozásában kiemelkedő szerepe van a Ras fehérjecsalád tagjainak, ezen belül is a KRas fehérjéknek. Ezen enzimek GTPáz aktivitása felel a GTP GDP-vé történő átalakításáért. GTP-kötött állapotában a fehérje képes a jel továbbítására, GDP-kötött állapotában viszont inaktív. Annak érdekében, hogy az inaktiváció megfelelő sebességgel lejátsszódjon a KRas-hoz kapcsolódó GAP (GTPase activating protein) fehérjék gyorsítják a GTP hidrolízist. Azonban a KRas fehérje mutációjának hatására a segédfehérjével való kölcsönhatás legyengül, ami a GTPáz aktivitásának csökkenését is okozza. Ennek eredményeként pedig a fehérje nem tudja ellátni a jelátviteli hálózatban betöltött szerepét, ami a sejtek proliferációs és osztódással kapcsolatos folyamatainak sérüléséhez, így daganatok kialakulásához vezet.

Felmerülhet a kérdés, hogy van-e lehetőség a jelátviteli útvonalak szabályozásának visszaállítására, azaz a KRas mutánsok aktivitásának növelésére. A közelmúltban vizsgálták az RGS3 fehérje hatását az egyik leggyakrabban előforduló KRas mutánsra (G12C), aminek eredményeként azt találták, hogy az RGS3 képes volt katalitikus hatást kifejteni a KRas G12C-re [1]. Ebből adódóan az RGS3 fehérjének a pontosabb megismerése elősegítheti a daganatterápiás módszerek fejlődését.

Kutatásunk célja, hogy a KRas G12C és G12D mutánsokat aktiválni képes RGS3 fehérje hatását vizsgáljuk. A két fehérje kötődésének erőssége jelenleg még ismeretlen, ezért bioréteg interferometriás (BLI) módszerrel kívánjuk nyomon követni a fehérjék közti kölcsönhatást, valamint kvantitatív adatokat szolgáltatni róla. Emellett MESG-PNP enzimaktivitásmérő módszerrel vizsgálni szeretnénk azt is, hogy az RGS3 aktív centrumát magába foglaló kristályosítható domén szintén képes-e a KRas mutánsok aktiválására.

Referenciák:

[1] Li, C.; Vides, A.; Kim, D.; Xue, J. Y.; Zhao, Y.; Lito, P.; *Science*, **2021**, (374), 197-201.



AZ IONIZÁLÓ SUGÁRZÁSOK HATÁSA A TP53 DEFICIENS ZEBRAHAL EMBRIÓKRA

Németh Barnabás^{1,2}, Polanek Róbert², Annus Tamás¹, Dudás Júlia², Varga Máté¹, Szabó Emília Rita²

*¹Eötvös Loránd Tudományegyetem, Genetikai Tanszék, Halgenetikai kutatócsoport,
1117 Budapest, Pázmány Péter stny. 1/C*

²ELI-ALPS Orvosbiológiai Alkalmazások csoport, 6728 Szeged, Wolfgang Sandner u. 3.

A különböző ionizáló sugárzások jól dokumentált DNS-károsító hatásnak számítanak. Az ilyen sugárzásnak való tartós kitettség súlyos következményekkel járhat egészségünkre, ezért fontos a sugárzás molekuláris, rövid és hosszú távú következményeinek tanulmányozása modellszervezetek segítségével. Két különböző zebrahal (*Danio rerio*) törzs, pharyngula periódusban levő embrióit, 250 keV-os röntgensugárzásnak tettük ki, majd ezt követően túlélési, kikelési és morfológiai elváltozás elemzést végeztünk. Kísérleteinkhez egy már jól tanulmányozott *tp53* deficiens törzset (*tp53^{M214K}*) használtunk, illetve kontrollként a vad típusú AB törzset. A Tp53 az egyik legfontosabb tumorsuppresszor fehérje, amely emberi rákos megbetegedésekben gyakran hordoz különböző mutációkat. Kulcsfontosságú szerepe van a sejtciklus és az apoptózis szabályozásában, a sejt élettani állapotától függően. Kis mérete, gyors egyedfejlődése és alacsony költségigénye miatt a zebrahal egy rendkívül jó modellszervezet viszonylag nagyszámú kísérlet elvégzésére, melyek során nagy mennyiségű, megbízható adat generálható, ezért ideális jelölt vizsgálatainkhoz. A vad típusú és *tp53* mutáns halembriókat és lárvákat négy napon keresztül figyeltük meg, miután különböző dózisu röntgenforrással kezeltük, és naponta mikroszkópos megfigyelés során rögzítettük túlélési arányukat és a különböző fellépő fejlődési rendellenességeket (a gerinc kóros görbületét és a szívburok ödéma megjelenését), amelyek a kezelés következtében keletkeztek.

Az általunk kifejlesztett kísérleti paradigma későbbiekben felhasználható lehet az ionizáló sugárzások más, a genom fenntartásában és a DNS-javításban is fontosnak tartott gének mutációira gyakorolt hatásainak vizsgálatára.



KANNABINOID ANALÓG FLUORESZCENS BOROIZOKINOLINOK

Pásztor Bettina^{1,2,3}, *Szepesi Kovács Dénes*^{1,2,3}, *Keserű György Miklós*^{1,2,3}, *Ábrányi-Balogh Péter*^{1,2,3}

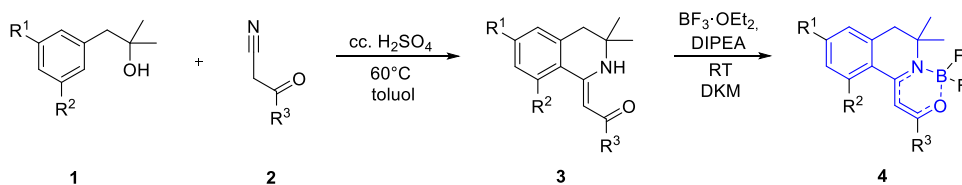
¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék; 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

²ELKH TTK, Gyógyszerkémiai Kutatócsoport; 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.

³Nemzeti Gyógyszerkutató és Fejlesztési Laboratórium; 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.

Az alkaloidok családjába tartozó izokinolinok számos ma is használt gyógyszer alapvázát képezik [1]. Továbbá kutatócsoportunk fluoreszcens boroizokinolinjai [2] is izokinolin-alapvázúak, amiben a fluorboranil-csoport kiterjedt gyűrűrendszert képez. Ez a rendszer analógiát mutat a kannabinoid receptor agonista Δ 9-tetrahidrokannabinollal (Δ 9-THC) [3]. Feltételezésünk szerint a boroizokinolin vázas vegyületek affinitást mutathatnak kannabinoid (CB) receptorok felé, amelyek fluoreszcens ligandumokkal roncsolásmentesen vizsgálhatóak, fontos információkat szolgáltatva a receptor-ligandum kölcsönhatásokról.

Ahhoz, hogy a boroizokinolin vázas molekula potenciálisan CB aktív legyen, a korábban a kutatócsoportunkban előállított molekulát 4 ponton módosítjuk különböző szubsztituensekkel, amelyek hatását is vizsgáljuk. A kiindulási tercier alkoholból (1) Ritter-reakcióval jutottunk az izokinolin vázhoz (3). Majd bór-trifluorid dietil-éterrel alakítottuk ki a triciklusos rendszert (4). Az így kapott vegyületeket ezután fotospektroszkópiai módszerekkel jellemeztük (fényesség, Stokes-eltolódás, fotostabilitás).



1. ábra: A boroizokinolinok szintézisútja. késsel a Δ 9-THC analóg molekularészlet

A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-2-I-BME-164 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Referenciák:

- [1] Pertwee, R. G.; *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences*, **2012**, (367), 3353–3363.
- [2] Sóvári, D. et al.; *RSC Advances*, **2018**, (8), 38598–38605.
- [3] Aizpurua-Olaizola, O. et al.; *Drug Discovery Today*, **2017**, (22), 105–110.



RBD-ALAPÚ ELISA DIAGNOSZTIKAI MÓDSZER FEJLESZTÉSE A SARS-COV-2 VÍRUSVARIÁNSOK ELLENI HUMORÁLIS IMMUNITÁS VIZSGÁLATÁRA

Szabó Kata Sára^{1,2}, *Móznér Orsolya*¹, *Hirsch Edit*³, *Vaskó Dorottya*³, *Domján Júlia*³,
*Fehér Csaba*⁴, *Moldvay Judit*⁵, *Sarkadi Balázs*¹

¹ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Enzimológiai Intézet, 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.

²Eötvös Loránd Tudományegyetem, Genetikai Tanszék, Természettudományi Kar, 1117 Budapest,
Pázmány Péter stny. 1/A

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

⁴Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,

Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszertudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

⁵Országos Korányi Pulmonológiai Intézet, 1121 Budapest, Korányi Frigyes út 1.

Kutatásunk célja a SARS-CoV-2 tüskefehérje (Spike) receptor-kötő doménjét (RBD) felismerő antitestek kimutatása volt, humán szérum mintákból a vírus variánsok elleni humorális védelem kvantifikálására. Ennek érdekében kifejlesztettünk egy egyszerű, gyors, nagy áteresztőképességű ELISA esszét az új SARS-CoV-2 variánsok elleni antitest-alapú immunitás vizsgálatára. A wuhani és az Omicron vírus változatainak megfelelő RBD fehérjéket emlős sejtes expressziós rendszerben állítottuk elő, úgy hogy azok szerkezetüket megőrzik és az ún. neutralizáló antitestek felismerik [1]. A kidolgozott ELISA módszerben a wuhani és Omicron variánsoknak megfelelő RBD fehérjével bevont mikrolemezeket hígított humán szérum mintákkal, majd humán IgG elleni, tormaperoxidázzal jelölt másodlagos antitesttel inkubáltuk, a peroxidáz aktivitást egyszerű festék reakcióval mértük. A beállított ELISA esszé alkalmas a wuhani és különböző Omicron variánsok elleni IgG antitestek kimutatására újbegyéből nyert vérmintákból. Vizsgáltunk vakcinálás utáni, valamint betegségen átesett, de oltást nem kapott páciensektől származó szérum mintákat. Az ELISA eredményeket a wuhani variáns elleni antitestek mérésére alkalmas standard Abbott módszer eredményeivel hasonlítottuk össze és szoros korrelációt találtunk. Ez az egyszerű és gyors, az újonnan megjelenő SARS-CoV-2 vírusvariánsokkal szembeni immunválasz kimutatására is könnyen módosítható teszt segíthet a fertőzést vagy vakcinációt követő humorális vírusellenes védelem széleskörű felmérésében.

Referenciák:

[1] Amanat, F; et al; *Nature Medicine*, 2020, 26(7), 1033-1036.



ABSTRACTS OF STUDENT POSTERS



XYLITOL PRODUCTION BY *CANDIDA BAOTIANENSIS*

Kata Buda, Csaba Fehér

*Budapest University of Technology and Economics, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology,
Department of Applied Biotechnology and Food Science, Biorefinery Research Group, 1111 Budapest,
Műgyetem rkp. 3.*

Xylitol is a five-carbon sugar-alcohol that is mainly used in the food industry as a natural sweetener. Xylitol is currently produced by the chemical reduction of xylose on an industrial scale. However, microbial production of xylitol could offer a more sustainable and cost-effective alternative. The most efficient xylitol-producing species belong to yeasts of *Candida* [1].

Novel isolate of the nonconventional yeast of *Candida baotianensis* NCAIM Y02288 was investigated in this study. Xylitol fermentation experiments were carried out to prove its applicability in xylitol production and to optimise fermentation conditions. Fermentations were performed in 100 mL-shake flasks for 72 hours at 30 °C. Aerobic (220 rpm, 20 mL medium) and so-called micro-aerobic conditions (125 rpm, 50 mL medium), two types of medium (YPX: yeast extract, peptone, xylose; semi-defined medium: yeast extract, KH_2PO_4 , $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$, xylose), different temperatures (22 °C, 30 °C, 38 °C) and different pH-s (pH 4, pH 5, and pH 6 in 0.01 M citrate buffer) were tested.

Under micro-aerobic condition, more xylitol were produced than under aerobic condition, where the increase of cell mass was favoured. Fermentations under micro-aerobic condition on YPX and semi-defined media resulted in xylitol yields of 59 % and 58 %, respectively, after 72 hours. In terms of temperature, 30 °C turned out to be the best with 61 % xylitol yield on YPX medium under micro-aerobic condition. The effect of different pH-s on xylitol yield was examined on YPX medium at 30 °C and the highest xylitol yield (66 %) was achieved by using pH 4, after 72 hours.

C. baotianensis NCAIM Y02288 was found to be a promising new candidate for xylitol production, however further experiments are needed to optimise fermentation conditions in order to improve xylitol yield and productivity.

References:

- [1] Bedő, S.; Fehér, A.; Khunnonkwao, P.; Jantama, K.; Fehér, C.; *Agronomy*, **2021**, 11(1), 79.



JEGYZETEK



JEGYZETEK



JEGYZETEK



Szerkesztő: Balogh Marcell János

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

XVI. Szent-Györgyi Albert Konferencia

ISBN 978-963-421-907-1