

Kémiatudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

Kémia- és környezettudomány

Kémiatudomány		
	Szekcióelnök:	Dr. Juhász László (DE)
I. panel	10.30-10.45	Kedves Alfonz
	10.45-11.00	Benedek Zsolt
	11.00-11.15	Császár Zsófia
	11.15-11.30	Golcs Ádám
	11.30-11.45	Hámori Csaba
	11.45-12.00	Balogh Bettina
	12.00-12.15	Székely Enikő
	12.15-12.30	Váczi Violetta
	12.30-12.45	Zwillinger-Tripolszky Anna

Kémiatudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

Grafén-oxid hatása a granulált iszapos bioreaktor működésére: szerves anyag-, nitrogén- és foszfor eltávolítás, polimer anyagok kiválasztása és a mikrobiális közösség változása
KEDVES Alfonz¹, RÓNAVÁRI Andrea¹, KESSERŰ Péter², BALÁZS Margit², KISS István², KÓNYA Zoltán^{1,3}.

¹Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Természettudományi és Informatikai Kar, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1, Magyarország.

²Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közhasznú Nonprofit Kft., 6726 Szeged, Derkovits fasor 2, Magyarország.

³MTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1, Magyarország.

Tudományterület: nanorészecske előállítás, biológiai szennyvíztisztítás

kedvesalfonz@yahoo.com

Kutatásunk során a grafén-oxid (GO) nanorészecskék (15, 25, 35, 55, 75 és 95 mg/L koncentrációban 7 napon át) biológiai aerob granulált iszapos (AGS) szennyvíztisztítási eljárásra gyakorolt hatását vizsgáltuk. A kísérletek során a bioreaktorok működését, extracelluláris polimer anyagok (EPS) kiválasztását és a mikrobiális közösség változását vizsgáltuk. Az eredményeink alapján megállapítottuk, hogy a GO nanorészecskék a bioreaktorok működésére gyakorolt hatása függ a betáplált részecske mennyiségétől és annak időbeni változásától.

A GO nanorészecskék 15, 25 és 35 mg/L mennyiségben az elfolyó szennyvízben nem okoztak jelentősebb szervesanyag és ammónia koncentráció növekedést. Viszont 55, 75 és 95 mg/L koncentrációban alkalmazva számottevően csökkentették a szervesanyag és ammónia eltávolítási hatásfokát. A nitrit és nitrát eltávolítására nem fejtettek ki negatív hatást. A biológiai foszfor eltávolítás csökkenése már alacsony GO koncentráció esetében is megfigyelhető volt. Az EPS mennyisége is változott a szennyvíztisztítás hatásfokának változásával. A nagy mennyiségű GO jelentős voltázásokat okozott a mikrobiális közösségben. A 16S rRNS gének szekvenálása alapján a *Paracoccus* sp., *Klebsiella* sp., és *Acidovorax* sp. fajok bizonyultak a legellenállóbb törzseknek.

Kulcsszavak: biológiai szennyvíztisztítás, vízkémia, extracelluláris polimer anyagok, mikrobiális közösség.

Kémia tudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

Az elméleti kémia alkalmazási lehetőségei új típusú, bioinspirált ammóniaszintézis-katalizátorok tervezésében

BENEDEK Zsolt

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Kémiai tudományok

benedek.zsolt@mail.bme.hu

Napjaink egyik legfontosabb alapvegyszerét, az ammóniát, évi több mint 140 millió tonnás mennyiségben állítják elő világszerte. Az ammóniaszintézis szinte kizárólagosan a Haber-Bosch eljárás alapján alakul, amely a magas energiaigénye miatt (több száz °C hőmérséklet és több száz bar nyomás szükséges) igen környezetterhelő – becslések szerint az üvegházhatású gázok kibocsátásának több mint 1%-a erre az egyetlen kémiai reakcióra vezethető vissza. Bő egy évszázaddal a tradicionális eljárás feltalálása után tehát egyre sürgetőbb egy új típusú, környezetbarát ammóniaszintézis kifejlesztése.

Mivel a természetben léteznek olyan rendszerek (az ún. nitrogénáz enzimek), amelyek a légkör nitrogéntartalmát szobahőmérsékleten és légköri nyomáson is képesek ammóniává alakítani, kézenfekvő lenne ez alapján újragondolni a katalizátortervezést. A bioinspirált katalizátorok (szintetikus nitrogénázok) valóban ígéretes alternatívát jelentenek, azonban egy kísérleti kutatócsoportnak sem sikerült még gyakorlati célokra alkalmazható mesterséges rendszert előállítani – folyamatosan visszatérő probléma a szintetikus nitrogénázok alacsony élettartama (azaz gyors deaktiválódása), illetve alacsony szelektivitása (NH_3 mellett H_2 termék is keletkezik), és ezeknek a folyamatoknak a mechanizmusa – annak ellenére, hogy ez a tudás nélkülözhetetlen lenne a katalizátorok racionális tervezéséhez - máig nem tisztázott.

Kutatócsoportunk célul tűzte ki, hogy az elméleti kémia eszköztárával felderítsük a mesterséges nitrogénázokon lejátszódó főreakció (NH_3 -fejlődés) és mellékreakciók (H_2 -fejlődés, deaktiválódás) azon összefüggéseit, amelyek pusztán kísérletek alapján nem láthatók. Kvantumkémiai számításaink révén részletesen felderítettük a potenciális reakcióutakat, és azonosítottuk azokat a kulcslépéseket, amelyek a vizsgált katalizátorok teljesítményét alapvetően meghatározzák. Hipotéziseinket a reakcióelegy szimulációjával és a kapott eredmények kísérleti adatokkal való összevetésével értékeltük ki. Az általunk feltárt összefüggések alapján, a katalitikus mechanizmus megértésével lehetőség nyílik új, nagyságrendekkel hatékonyabb bioinspirált rendszerek kifejlesztésére.

A bioinspirált katalizátorok tervezése egy jellegzetes példája annak, hogy az elméleti kémia napjainkban a kísérletek egyenrangú partnere a kutatásban. Fontos megjegyezni azt az általános trendet, hogy mivel a számítógépek dinamikus növekvő teljesítménye és a mesterséges intelligencia ugrásszerű fejlődése egyre nagyobb mozgásteret és pontosságot ad az elméleti kémiának, a jövőben a számítások szerepe egyre jobban felértékelődik – mind az akadémiai, mind az ipari szférában.

Kémiatudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

Aromások alkilezése heteropolisav-tartalmú katalizátorok felhasználásával

CSÁSZÁR Zsófia, BAKOS József, FARKAS Gergely

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

Tudományterület: szerves kémia

csaszofi@gmail.com

A heteropolisavak számos kedvező tulajdonságuknak és környezetbarát felhasználásuknak köszönhetően széles körben alkalmazhatók katalizátorként, homogén- és heterogén-katalitikus reakciókban egyaránt. A Keggin-szerkezetű heteropolisavak előnyös sajátságai, úgymint a nagy stabilitás és az ásványi savaknál erősebb Brønsted-savasság vonzóvá teszi savkatalizált reakciókban való alkalmazásukat. A heteropolisavak használatával kiválthatók a korrozív, kevésbé szelektív és korlátozott újrahasznosíthatósággal jellemezhető savas katalizátorok (pl. kénsav, hidrogén-fluorid, $AlCl_3$), így előtérbe került e vegyületek Friedel-Crafts alkilezési reakciókban való alkalmazása. Mindezek mellett fontos megemlíteni, hogy a heteropolisavak kis fajlagos felülettel rendelkeznek, így heterogén-katalitikus reakciókban való felhasználásukhoz egy nagy fajlagos felülettel rendelkező szilárd hordozóra van szükség. Az így nyert kompozitok a reakcióelegytől egyszerűen elválaszthatók és visszaforgathatók.

Munkánk során foszfor-volfrámsav (PTA) szilárd hordozókra történő rögzítésével heterogén katalizátorokat állítottunk elő a szilárd hordozó minőségének, illetve a rögzített PTA mennyiségének változtatásával. A kompozitok felületi borítottságát FT-IR és szilárd fázisú NMR spektroszkópiai módszerekkel tanulmányoztuk.

A heterogén katalizátorokat aromás szénhidrogének terminális olefinekkel történő Friedel-Crafts alkilezési reakciójában alkalmaztuk. A katalitikus kísérletekben vizsgáltuk az eltérő szerkezetű hordozókon azonos mennyiségű PTA-t tartalmazó kompozitok, valamint az azonos hordozóhoz rögzített, ám eltérő mennyiségű foszfor-volfrámsavval módosított katalizátorok aktivitását. Megállapítottuk, hogy az előállított katalizátorok rendkívüli aktivitással és jó szelektivitással szolgáltatják a reakció termékét. A reakciókörülmények optimalizálását követően különböző aromás szénhidrogének, valamint eltérő olefinek, mint alkilezőszerek Friedel-Crafts alkilezési reakcióját is tanulmányoztuk.

A szakaszos üzemű reakciókban elért kiváló eredmények és a katalizátorok kiemelkedő stabilitása lehetővé tették a kompozitok folyamatos átáramlásos kísérleti reaktorban való alkalmazását. A folyamatos üzemű kísérletekhez használt mikroreaktort toluol és 1-oktén alkilezési reakciójában teszteltük eltérő körülmények mellett. A nagy stabilitással rendelkező katalizátorokkal kiváló aktivitást értünk el folyamatos átáramlásos körülmények között is.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.

Kémiatudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

Bioaktív aminok nagy áteresztőképességű folyadékmembrán-szeparációs enantiomerdúsítása

GOLCS Ádám

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Kémiai tudomány

golcs.adam@gmail.com

Régóta ismert tény, hogy a királis bioaktív vegyületek különböző enantiomerjei eltérő biológiai hatást képesek kiváltani a természetes királis vegyületekkel létesített kölcsönhatásaik útján. A szigorodó hatósági előírások napjainkban megkövetelik a biogén vegyületek sztereoiszomerjeinek szeparált vizsgálatát és a legtöbb esetben enantiomertiszta formában történő forgalmazását. A 2000-es évekre a forgalmazott gyógyszerek több, mint fele királis hatóanyagot tartalmazott, illetve nagy részük legalább egy amin egységgel rendelkezett a funkciós csoport kedvező farmakokinetikai sajátságaiból és biohasznosulásából adódóan. A gyógyszerhatóanyag-kutatás korai fázisában a származékok minél szélesebb vegyületkörének előállítását célzó szintézisutak ritkán szolgáltatnak enantiomertiszta termékeket. A preklinikai fejlesztés során a tükörképi izomerek elválasztásának problémáját jellemzően az előzetes, specifikus módszerfejlesztésen alapuló királis HPLC technikák, valamint a nagyobb mintamennyiséget igénylő rezolválási eljárások segítségével oldják meg. Bár található pár szakirodalmi példát plate-alapú vagy egyéb, membránon keresztüli enantiomerszeparációt célzó eljárásra, a nagy áteresztőképességű, kisléptékű enantiomerdúsítás problémája nem megoldott. Ezen tények a királis amin típusú „gyógyszerszerű” molekulák széles köre mellett indokoltá teszik az említett vegyületkört célzó, kis mintaigényű enantiomerszeparációs eljárás fejlesztését.

Kutatócsoportunkban számos alkalommal állítottak elő biogén amin típusú enantiomerekkel szemben jelentős sztereoselektív molekuláris felismerést mutató akridin egységgel rendelkező makrociklusokat, melyeket enantiomerszenzor-, illetve szelektormolekulaként alkalmaztak. Munkánk során sikerült a korábbi oldatfázisú vizsgálataink során optikailag aktív biogén aminok körében jelentős enantiomerfelismerést mutató makrociklusok lipofil származékait folyadékmembránban rögzíteni és plate-rendszerbe integrálni. Ezt követően vizsgáltuk az amin enantiomerek membránpermeációjának kinetikáját, szerkezet-hatás összefüggéseit, valamint elvégeztük a folyamat fizikokémiai paramétereinek optimalizálását. Vizsgálataink alapján a rögzített királis szelektormolekulák jelenléte enantiomerszelektív membránretenciót eredményezett a polimer plate donor-, illetve akceptor fázisai között, mely lehetővé tette különböző amin-, aminosav-, valamint egyéb neurotranszmitter származékok racém elegyből kiinduló milligrammos léptékű enantiomerdúsítását. A fejlesztett mikroplate-alapú folyadékmembrán-szeparációs eljárás segítségével sikerült megvalósítanunk néhány biogén modellvegyület 4-5 konsekutív membránpermeáció általi jelentős ($ee > 70\%$) enantiomerdúsítását, mely eljárás a későbbiek folyamán könnyedén integrálható automatizált folyadékkezelő, így különböző robotizált HTS-rendszerekbe. Az eljárás kiterjeszhetőségének vizsgálata jelenleg is folyamatban van.

Kémiatudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

Rovar eredetű α -amiláz tisztítása és jellemzése

HÁMORI Csaba

Képzőintézmény/munkahely: Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Tudományterület: Kémia

e-mail: hamoricsaba@science.unideb.hu

A munkánk során a kolorádóbogár (*Leptinotarsa decemlineata*, Say) eredetű α -amiláz vizsgálatát végeztük el. A kolorádóbogár levél kártevő, a burgonyafélék (*Solanaceae*) leveleivel táplálkozik, ezzel meglehetősen nagy mezőgazdasági kárt okozva. A növény leveleiben történik a fotoszintézis, tehát azon szénhidrátok előállítása, mellyel a növény az energia ellátását fedezi. A növényevő rovarok fő emésztő enzimei a glikozid-hidrolázok. Az általunk vizsgált kolorádóbogár eredetű bél extraktum α -amiláz, α - és β -glükozidáz aktivitását foglaltuk össze előző közleményünkben. Mivel az amiláz a fő enzim, amely szerepet játszik a keményítő lebontásában, ezért vizsgálatainkban erre az enzimre fókuszáltunk. A bontási kép meghatározása során több problémába ütköztünk. A bél extraktumban mindhárom enzim aktívnak bizonyult, ezért a bontási kép meghatározása során figyelembe kellett venni a két exoenzim működését is, ami nagy mértékben megnehezítette a mérési eredmények kiértékelését. Ezen kívül eredményeink alapján a kolorádóbogár eredetű α -amiláz rendelkezik transzglykoziláz aktivitással is, mivel a rövidebb láncú bontási termékek mellett a kiindulási szubsztrátnál hosszabb láncú termékek megjelenését is tapasztaltuk. A mérési eredmények kiértékelésének bonyolultsága miatt az α -amiláz tisztítása vált szükségessé. Erre a célra sikerrel alkalmaztam a keresztkötött keményítő gélen történő affinitás kromatográfiás elválasztást. Egy szénhidrát bontó enzim bontási képének meghatározása által az aktív centrum szerkezetéről kaphatunk információt. Ekkor különböző jelölt szubsztrátok segítségével vizsgálhatjuk az enzim és a szubsztrát közötti kölcsönhatásokat. Vizsgálatainkhoz olyan különböző számú (4-8) α -1,4 glikozidos kötással kapcsolódó glükóz egységből felépülő maltooligoszacharidokat választottunk szubsztrátként, amelyeknek a redukáló vége, illetve a redukáló és nem redukáló vége is kromofor csoporttal van jelölve, így a termékek folyadékkromatográfiás elválasztást követően detektálhatók UV detektorral. A különböző lánchosszúságú szubsztrátokon történő bontás vizsgálatok eredményeképp az oligoszacharid termékek arányának meghatározásával megadható az enzim alhelyeinek szerkezete. Távlabbi cél a bontási kép alapján megfelelő inhibitorok keresése, valamint tesztelése, amivel a rovar által okozott mezőgazdasági károk drasztikusan csökkenthetők. További vizsgálatokat végzünk az enzim transzglykoziláz aktivitásának felderítésére. Kérdéses lehet, hogy mekkora lánchosszúságú az a donor és akceptor, amivel végbemegy a reakció. Ezen aktivitás felhasználható lehet az iparban hosszú láncú oligoszacharidok költséghatékony előállítására, valamint orvosi diagnosztikában alkalmazott készítmények készítésére.

Kémiatudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

A Tau (326-333) mutánsok réz(II)komplexeinek összehasonlítása

BALOGH Bettina Diána; **SZAKÁCS Bence**; **VÁRNAGY Katalin**
Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Kémia

balogh.bettina@science.unideb.hu

A Tau-fehérje legnagyobb mennyiségben az idegsejtek axonjaiban fordul elő, ahol a mikrotubulusok összeszerelésében és később stabilizálásukban játszik szerepet. Ezzel összefüggésben részt vesz a neuronok morfológiájának kialakításában, fenntartásában és az axonális átvitelben. A Tau működését foszforiláltsági állapota határozza meg: defoszforilált állapotban a mikrotubulusokhoz kötődve stabilizálja a hálózatot, foszforilációját követően pedig leválik onnan, így a mikrotubulusok átépülhetnek. Kóros esetben hiperfoszforiláció következik be, ami egyrészt meggátolja a mikrotubulusokhoz való kapcsolódást, másrészt fokozza a fehérje aggregációs hajlamát.

A neurodegeneratív taupátiák jellemzője az abnormális Tau-filamentumok intracelluláris felhalmozódása, melyek neurofibrilláris kötegeket és egyéb Tau-lerakódásokat képeznek a neuronokban és a gliasejtekben.

Számos publikáció jutott arra a következtetésre, hogy a fémionok fontos szerepet játszanak a neurodegenerációban. A fémionok Tau-fehérjéhez, illetve a protein különböző peptid-fragmenseihez való kötődése a tudomány egy kevésbé tanulmányozott területe. Széles körben elfogadott, hogy a Tau aggregációját és a toxikus fehérjelerakódások képződését a protein hiperfoszforilációja váltja ki, mely folyamatra a különböző fémionok jelentős hatást gyakorolhatnak.

A fehérjék leggyakoribb fémion megkötő helyei a ciszteinek tiolát-kénatomjai, illetve a hisztidinek imidazolnitrogénjei. A Tau relatíve gazdag ezekben az oldalláncokban, különösen hisztidinben, melyek a szekvenciában viszonylag távol helyezkednek el egymástól, így bármelyikük betöltheti a horgonycsoport szerepét. Kutatócsoportunkban jelenleg a Tau fehérje szisztematikus vizsgálata folyik egy nemzetközi együttműködés keretében. A fehérje 12 hisztidil oldallánca különböző környezetekben található, így várhatóan – ha csak kis mértékben is, de – fémion megkötő képességük eltér.

Az Ac-GNIIHHKPG-NH₂-fragmens két hisztidint tartalmaz egymás melletti pozíciókban, de az eddigi vizsgálatokból nem derült ki, hogy melyik a réz(II)ion elsődleges kötőhelye. A másik felmerülő kérdés, hogy vajon a prolin "lánctörő" szerepe befolyásolja-e a fémion kötődését, akadályozza-e két fémion koordinálását. Ahhoz, hogy ezekre a kérdésekre választ kapjunk a natív szekvencia mellett a ligandum pontmutánsainak (Ac-GNIIHHKAG-NH₂ és Ac-GNGHHKPG-NH₂) réz(II)ionnal megvalósuló komplexképződését vizsgáltuk pH-potenciometria, UV-Vis spektrofotometria és cirkuláris dikroizmus spektroszkópia segítségével.

Összehasonlítva a vizsgált ligandumok Cu(II)-komplexeinek összetételét és stabilitását, megállapítható, hogy az izoleucin glicinre, illetve a prolin alaninra történő cseréje nem okoz nagymértékű változást a kialakuló egymagvú komplexek stabilitásában. Ligandum-felesleg jelenlétében és ekvimoláris oldatban ugyanolyan összetételű komplexek keletkeztek mindhárom peptidnél, valamint hasonló stabilitási állandókat kaptunk az ugyanolyan koordinációs módú komplexeknél. Fémion-felesleget alkalmazva volt különbség a kialakuló

Kémiatudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

komplexek összetételében, ami a prolin „lánctörő” szerepére vezethető vissza, habár a jelenléte nem akadályozza meg, hogy az amidkoordináció a C-terminális vég irányába is elinduljon.

Köszönetnyilvánítás:

A kutatás az NKFIH K115480 számú pályázatának támogatásával, valamint a GINOP-2.3.-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával készült.

Kémia tudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

Az oldalláncok szerepe a peptidok fémionkötő képességének finomszabályozásában

SZÉKELY ENIKŐ

Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Bioszervetlen és koordinációs kémia

szekely.eniko@science.unideb.hu

A peptidok nagy fémionkötő affinitással rendelkeznek, de mind a peptidkomplexek termodinamikai stabilitását, mind koordinációs geometriáját jelentősen befolyásolja a ligandumok aminosav szekvenciája. A Kutatócsoportunkban folyó munkák egyik területe a különböző donorcsoportokat tartalmazó polipeptidek szintézise és komplexképződési folyamatainak vizsgálata. Biológiai szempontból a legjelentősebbek azok a polipeptidek, amelyek modellezik a metalloproteineket. Ezekben a metalloproteinekben a hisztidin imidazolil csoportja a leggyakoribb kötőhely az átmeneti fémionok számára. Az ilyen fémion-fehérje kölcsönhatás szerepet játszik például a Cu,Zn-szuperoxid-dizmutáz enzim működésében, illetve a neurodegeneratív betegségek kialakulásában.

Csoportunkban olyan multihisztidin peptideket szintetizáltunk, amelyekben az aminosav szekvencia szisztematikus változtatását hajtottuk végre, majd meghatároztuk a komplexeik egyensúlyi, szerkezeti és elektrokémiai paramétereit. Ezen molekulák közé tartoznak azok a 4-7 aminosavból álló oligopeptidek, amelyek a hisztidint különböző pozíciókban és környezetben tartalmazzák. Ezen oldalláncok specifikus hatásainak megértéséhez következetesen változtattuk a szekvenciában az aszparaginsavat, a fenilalanint és a lizint: Ac-HXYH-NH₂, Ac-HXHYH-NH₂, Ac-HXYHZH-NH₂ és Ac-HXHAHXH-NH₂ (X, Y, Z = Ala, Phe, Asp, Gly, Val, Lys). Ezen multihisztidin peptidek réz(II), nikkell(II) és cink(II)komplexeinek egyensúlyi, szerkezeti és elektrokémiai vizsgálatait végeztük el. A komplexek sztöchiometriáját, stabilitását és szerkezetét pH-potenciometria, UV-látható spektrofotometria, CD spektroszkópia és ESI-MS technikák alkalmazásával vizsgáltuk. A réz(II)komplexek elektrokémiai paramétereit ciklikus voltametriás mérésekkel határoztuk meg.

Az eredmények azt mutatják, hogy a fémkomplexek stabilitása jelentősen függ a fémiontól, a hisztidinek számától és pozíciójától, valamint a környezetétől. Ezek a következtetések arra utalnak, hogy a komplexek termodinamikai és szerkezeti tulajdonságai befolyásolhatók a fémionok koordinálásában résztvevő donoratombok körül található aminosavak minőségének és helyzetének változtatásával. Így a peptidok szekvenciájának szisztematikus tervezése növelheti a peptidok fémionkötő képességének szelektivitását.

Köszönetnyilvánítás:

A kutatás az NKFIH K115480 számú pályázatának támogatásával, valamint a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával készült.

Kémiatudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395

Illegális hulladékok helyzete Magyarországon

VÁCZI Violetta

Pannon Egyetem Mérnöki Kar Környezetmérnöki Intézet

Kémiai és környezettudományi Szekció

vaczi.violetta@mk.uni-pannon.hu

Napjaink egyik gyakori környezetvédelmi feladata a legtöbbször főutak mentén, erdőkben, vagy egyéb köz- és magánterületen elhelyezett hulladékok, azaz az illegális hulladéklerakások felszámolása. Ezek oka legtöbbször a lakossági szemléletben keresendő, ugyanis többen költségesnek vagy bonyolultnak találják a lakossági hulladékszállítás rendszerét, így egy nagyobb mennyiségű, váratlan hulladékfelhalmozódás esetén inkább a könnyebb, de jogszabályellenes utat választják a hulladékoktól való megszabadulás érdekében. Ezen hulladékok többségében lakossági eredetű lomhulladékból vagy háztartási szemétből tevődnek össze, azonban előfordul köztük veszélyes anyagokat tartalmazó kislejtezett elektronikai berendezés vagy azbeszt tartalmú palatető is, amely akár alkalmas lehet az élővilág, valamint az emberi egészség veszélyeztetésére, emellett tájképvédelmi szempontból is rendkívül zavaró hatása van.

Az illegális hulladéklerakások esetében legtöbbször nehéz meghatározni a hulladéklerakás kezdő időpontját, valamint felmérni az elszállítást megelőzően és azt követően is a lerakás által környezetben okozott károkat. A hulladékok hatását a környezetre nagyban meghatározza a lerakott hulladék összetétele, veszélyes anyag tartalma, mennyisége, a kihelyezés időtartama, az érintett ökoszisztéma (fizikai-kémiai-biológiai) tulajdonsága, valamint a terület természetvédelmi és érzékenységi besorolása.

A kutatásom során ezen tényezőket vizsgálva, regisztrált illegális hulladéklerakásokról szóló adatok feldolgozása által, egy kiválasztott környezetállapot-értékelési mennyiségi módszer segítségével kívánom meghatározni az adott hulladéktípus környezetterhelésének mértékét több környezeti elemre vonatkoztatva. Kutatásom első szakaszában a vizsgálathoz gyűjtöttem adatokat az illegális hulladéklerakásokról, jellemzően a Közép-Dunántúl területén. Az adatokat elsősorban a Veszprém Megyei Rendőrfőkapitányság, valamint a Nyugat-Dunántúli Vízügyi Igazgatóság szolgáltatta. Az adatokból meghatároztam, hogy adott vizsgálati területen a térség meghatározó életviteli kompetenciáinak megfelelően az elhagyott hulladékokat más-más összetétel jellemzi. Ez által összefüggés fedezhető fel a települések tevékenységi és szociális adottságai, valamint a lerakott hulladéktípusok között.

Potenciális bioaktivással rendelkező 1,2,3-triazolil-5-foszfónátok szintézise dominó reakcióval

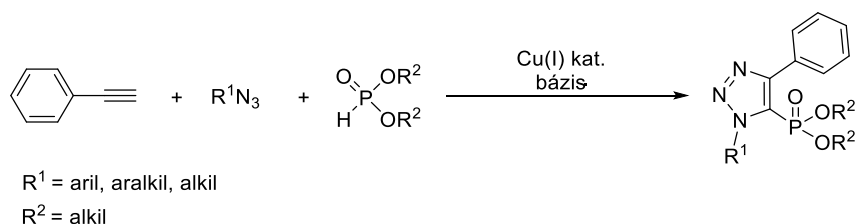
ZWILLINGER-TRIPOLSZKY Anna

Szerves Kémia és Technológia Tanszék (BME-VBK)

Kémiai és környezettudomány (szerves kémia)

anna.tripolszky@gmail.com

Az 1,2,3-triazolok kutatási területe kiemelkedő figyelemnek örvend a vegyületcsalád széleskörű felhasználhatóságának köszönhetően. Egyes triazol-származékok például LCD kijelzők építőelemeiként hasznosíthatók, míg mások fluoreszcens jelzőmolekulákként vagy fotostabilizátorként alkalmazhatók. Több triazol tartalmú növényvédőszer is ismeretes. Mindemellett az 1,2,3-triazolokat – biológiai aktivitásuknak köszönhetően – a gyógyászatban számos indikációban alkalmazzák, például gombaellenes, rákellenes, vírusellenes vagy gyulladáscsökkentő szerként. Az 1,2,3-triazolok szerkezeti tulajdonságai és előállítási lehetőségei lehetővé teszik különféle funkciós csoportok, oldalláncok beépítését, melyek a vegyületek biológiai hatását nagymértékben befolyásolják. A triazol-származékok biológiai aktivitása például valamely szerves foszfortartalmú részlet beépítésével tovább növelhető. Az 1,2,3-triazolil-foszfónátok fontos építőelemek regiospecifikus antitestek és peptidek előállítása során, egyes származékaik pedig HIV-ellenes hatással rendelkeznek. Minezek figyelembevétel, kutatómunkánk célja egy 1,2,3-triazolil-5-foszfónátokat tartalmazó, diverz molekulakönyvtár létrehozása volt, melynek képviselői gyógyszerkémiai szempontból releváns funkciós csoportokkal és potenciális bioaktivással rendelkeznek. A vegyületek előállítását fenil-acetilén, változatos azidok és dialkil-foszfitek réz(I)-katalizált dominó reakciójával valósítottuk meg. Ezen többkomponensű reakciók előnye, hogy a többlépéses szintézisek atomhatékonyan és a köztitermékek izolálása nélkül valósíthatók meg. Kutatómunkánk során a dominó reakciót fenil-acetilén, benzil-azid, és dibutil-foszfitek modellreakcióján keresztül optimalizáltuk. Kísérleteink során számos paraméter hatását tanulmányoztunk, úgymint az alkalmazott atmoszférát, hőmérsékletet, a katalizátor, bázis és oldószer minőségét vagy a kiindulási anyagok molarányát. Az optimális körülmények kiterjesztésével számos új 1,2,3-triazolil-5-foszfónátot szintetizáltunk. A létrehozott molekulakönyvtár tagjai ígéretes biológiai aktivitást mutatnak rákellenes szerként.



Kémia tudomány
2020. október 16. 10.30-13.00
Szekciófelelős:
Herka Barbara, +36 70 354 6395