

Pannon Egyetem, Mérnöki Kari

Tudományos Diákköri Konferencia
2024. április 24.

A kiadványt összeállította: Dr. Ható Zoltán



EMBERI ERŐFORRÁS
TÁMOGATÁSKEZELŐ



KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM



Nemzeti
Tehetség Program

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar
Tudományos Diákköri Konferencia
2024. április 24.

Szerkesztette: Dr. Ható Zoltán

Kiadja a Pannon Egyetemi Kiadó
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

ISBN 978-963-396-283-1

© Pannon Egyetemi Kiadó, Veszprém, 2024.



Borítóterv: Vipler Nikolett
A kiadásért felelős a Pannon Egyetem rektora



A konferencia szervezői

Dr. Valiskó Mónika

egyetemi docens,
KTDT elnök

Komplex Molekuláris Rendszerek
Kutatócsoport

Dr. Ható Zoltán

tudományos munkatárs,
KTDT titkár

Komplex Molekuláris
Rendszerek Kutatócsoport

Kémia és Vegyipar I. tagozat

B konferencia-központ (1. tárgyaló)

9:00	Gacov Donát Adrián	Oxazolidinon származékok előállítása szén-dioxid C1 építőelemként történő felhasználásával ionfolyadék oldószerben	Skodáné Dr. Földes Rita, Ispán Dávid
9:20	Orosz Nándor	Ni(II)-ionokkal módosított Cd _{0,5} Zn _{0,5} S fotokatalizátor előállítása Na ₂ S ₂ O ₃ termikus bontásával	Dr. Fodor Lajos
9:40	Ferencz Orsolya	Fém-szulfiddal módosított grafityszerű szén-nitrid fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata	Dr. Fodor Lajos
10:00	Guóth Mária	Új irídium-tartalmú homogénkatalitikus rendszer kidolgozása királis alkoholok szintézisére	Dr. Farkas Gergely, Császár Zsófia

Tagozati zsűri

Elnök	Dr. Kovács Margit
Tag	Dr. Zsirka Balázs
Tag	Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet
Titkár	Váradi Márk

Oxazolidinon származékok előállítása szén-dioxid C1 építőelemként történő felhasználásával ionfolyadék oldószerben

*Készítette: Gacov Donát Adrián,
vegyész mesterképzési szak
Mérnöki Kar, Természettudományi Központ,
Szerves Kémiai Szintézis és Katalízis Kutatócsoport*

Témavezető: Skodáné Dr. Földes Rita, Ispán Dávid

A farmakológiai szempontból jelentős 2-oxazolidinon vázzal rendelkező molekulák előállításának újonnan elterjedt, ígéretes módszerét a propargil-amin származékok szén-dioxiddal történő karboxilatív gyűrűzárása nyújtja. Az utóbbi években számos olyan eljárást fejlesztettek ki, melyek átmenetifém-katalizátorokon és/vagy szerves szuperbázisokon alapulnak. Legtöbb esetben azonban érélyes körülményekre, bonyolult szerkezetű és drága katalizátorokra, valamint olyan poláris oldószer alkalmazására (pl. DMSO) van szükség, melyből a katalizátor/bázis nem, vagy nehezen nyerhető vissza, így a módszer nagy környezetterheléssel jár.

Ilyen problémák jó megoldása lehet, ha oldószerként imidazólium-alapú ionfolyadékokat alkalmazunk, amelyekről bizonyított, hogy szerves bázis jelenlétében kemisorpció révén a szén-dioxid aktiválását elősegítik. Továbbá nem csak alkalmas hordozói lehetnek az átmenetifém-katalizátoroknak, de aktivitásuk növelésében is szerepet játszanak.

Kutatómunkám során azt vizsgáltam, hogy a szén-dioxid beépítése propargil-amin származékokba megvalósítható-e ionfolyadék oldószerben. Az N-benzil-propargil-amin mint szubsztrátum felhasználásával optimalizáltam a gyűrűzáráshoz szükséges körülményeket és megállapítottam, hogy egyes katalizátor-bázis párok szinergikus hatása elősegíti a 2-oxazolidinon származék keletkezését. Bizonyítottam, hogy a kidolgozott katalitikus rendszer több cikluson keresztül alkalmazható a termék előállítására. A legalkalmasabbnak talált reakciókörülmények között további 3-as pozícióban helyettesített 5-metilén-oxazolidin-2-onokat állítottam elő.

Palládiumkatalizátor és jódaromás vegyületek jelenlétében a karboxilatív ciklizációt C-C kapcsolás is kísérheti, amelynek vizsgálata kutatómunkám másik részét képezi. A kezdeti eredmények alapján a reakció során termékelegy keletkezik, de a reakciókörülmények változtatásával a szelektivitás növelhető. A termékek izolálása és elválasztása után a főtermék szerkezetét NMR-spektroszkópiai mérésekkel sikerült igazolnom.

További terveim között szerepel a kapcsolási reakciók szelektivitásának növelése, az újrafelhasználhatóság vizsgálata, valamint mindkét rendszer esetében a szerkezet-reakciókészség közötti összefüggések feltárása.

Kulcsszavak: Oxazolidinon, C1 építőelem, ionfolyadék, szinergikus hatás, visszaforgathatóság

Ni(II)-ionokkal módosított Cd_{0,5}Zn_{0,5}S fotokatalizátor előállítása Na₂S₂O₃ termikus bontásával

*Készítette: Orosz Nándor,
vegyésmérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Természettudományi Központ,
Környezeti és Szervetlen Fotokémia Kutatócsoport*

Témavezető: Dr. Fodor Lajos

Napjaink egyre gyakrabban és növekvő komolysággal előkerülő globális problémája az emberi társadalom számára jelenleg szükséges energia stabil, hosszútávú biztosítása a Föld erőforrásainak és környezetünk épségének megóvása mellett. A fosszilis anyagok túlzott mértékű elégetéséből származó CO₂-kibocsátás már a közeljövőben klímakatasztrófával fenyeget, így fontos feladattá válik környezetkímélő, ugyanakkor hatékonyan használható alternatív energiaforrások feltárása. Egyik ígéretes lehetőség a hidrogén, melynek égése során nagy mennyiségű fajlagos energia szabadul fel, viszont nem keletkezik káros, üvegházhatású szén-dioxid. Számításba kell venni mindezek mellett a felhasznált hidrogén eredetét is. A hidrogén előállítható zöld eljárásokkal, például napenergia felhasználásával történő víz vagy más hidrogéntartalmú anyag bontásával. Az egyik ilyen eljárás a kén-hidrogén – vagy annak lúgos oldatának – fotokatalitikus bontása látható fény bevilágításával.

Hidrogénfejlesztésre jelenleg a szulfid-típusú fotokatalizátorok a legalkalmasabbak. Kutatócsoportunk már korábban arra az eredményre jutott, hogy az egyik leghatékonyabb kompozit a Ni(II)-ionokkal módosított Cd_{0,5}Zn_{0,5}S, melynek hatékonyságát nagymértékben befolyásolják az előállítási körülmények, köztük az előállításhoz használt Na₂S tisztasága, így annak beszerzési forrása is. E függőség kiküszöbölése végett jelen munkámban alternatív előállítási lehetőségeket vizsgáltam.

Szulfidforrásként a tioszulfátionok termikus bomlását használtam ki. A CdS-ZnS katalizátor előállítását különböző ammónia, illetve NaOH-tartalom mellett végeztem. A hőmérsékletet 90–260 °C tartományban változtattam, valamint egyes esetekben Zn: Cd arányt is változtattam. Az előállított kompozitok szerkezetvizsgálatára DRS, SEM, EDS és XRD felvételeket használtam, és emellett a fotokatalitikus H₂-fejlesztő képességet minden esetben ellenőriztem Na₂S-ot és Na₂SO₃-ot egyaránt tartalmazó áldozati oldat látható fényű bevilágításával. Az ígéretesebb katalizátorok aktivitását Ni(II)-ionokkal történt impregnálást követően is meghatároztam.

Kulcsszavak: CdS, ZnS, heterogén fotokatalízis, hidrogénfejlesztés, Na₂S₂O₃ termikus bomlása

Fém-szulfiddal módosított grafitserű szén-nitrid fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata

*Készítette: Ferencz Orsolya,
kémia alapképzési szak
Mérnöki Kar, Természettudományi Központ,
Környezeti és Szervetlen Fotokémia Kutatócsoport*

Témavezető: Dr. Fodor Lajos

Napjainkban egy igen komoly probléma a környezetszennyezés, különösen a légkörben és a természetes vizeinkben található szennyezőanyagok mennyisége, illetve a temérdek ipari melléktermék és hulladék felhalmozódása. A szennyezők ártalmatlanításának egy környezetbarát megoldása a heterogén fotokatalitikus lebontás, amely ugyanakkor megoldást nyújthat arra is, hogy mialatt szennyezőanyagokat oxidálunk a napfény energiájának felhasználásával, párhuzamosan a víz redukciójával hidrogént állítsunk elő, amiből CO₂ kibocsájtás nélkül termelhetünk energiát.

Jelentős hidrogénfejlesztő hatékonyság érhető el, ha víz helyett H₂S-t, vagy annak lúgos oldatát bontjuk. Emellett a H₂S felhasználásával egy igen toxikus ipari hulladék mennyiségét tudjuk csökkenteni, ami főként a kőolaj finomítása, illetve a földgáz tisztítása során szabadul fel melléktermékként.

Munkám során grafitserű szén-nitrid katalizátorok előállításával foglalkoztam, amelyeket különböző módszerekkel fém-szulfidokkal (CdS-ZnS) és/vagy Ni(OH)₂-dal módosítottam. Az előállított katalizátorokat egyrészt fotokatalitikus hidrogénfejlesztésre használtam fel, másrészt pedig szennyezőanyagok lebontására. Utóbbi nyomon követésére átfolyós rendszerben real-time UV-elnyelési szinkép mérést alkalmaztam, amellyel néhány perces időközönként akár 24 órás nyomon követés is lehetségesnek bizonyult.

Kulcsszavak: heterogén fotokatalízis, fém-szulfid, g-C₃N₄, hidrogén, lebontás

Új irídium-tartalmú homogénkatalitikus rendszer kidolgozása királis alkoholok szintézisére

*Készítette: Guóth Mária,
vegyész mesterképzési szak
Mérnöki Kar, Természettudományi Központ,
Szerves Kémiai Szintézis és Katalízis Kutatócsoport*

Témavezető: Dr. Farkas Gergely, Császár Zsófia

Az aszimmetrikus hidrogénezés segítségével értékes gyógyszerhatóanyagok és más biológiailag aktív molekulák, illetve azok intermedierjei állíthatók elő. Kivitelezésére átmenetifém-katalizátorok alkalmazhatók, melyek közül kiemelkednek az Ir-tartalmú királis fémkomplexek nagy aktivitásuknak köszönhetően. E komplexekben a C_2 szimmetriával rendelkező ligandumok mellett elterjedten alkalmaznak C_1 szimmetriájú, királis heterodonor ligandumokat is. A foszfor- és nitrogén donoratomokat tartalmazó kétfogú katalizátormódosító vegyületek (P,N-ligandumok) például jó aktivitásuk és szelektivitásuk miatt széles körben elterjedtek. E vegyülettípus módosításával előállított, potenciálisan háromfogú, OH-csoportot is tartalmazó (P,N,OH) ligandumok alkalmazásával azonban még tovább növelhető a hidrogénezési reakciók aktivitása és szelektivitása. E vegyületsalád intenzív kutatása csupán az elmúlt néhány évre tekint vissza.[1]

Munkám során új, oxigén-tartalmú oldallánccal rendelkező ligandumokat (P,N,O) állítottam elő és tanulmányoztam ezek katalitikus tulajdonságait acetofenon aszimmetrikus hidrogénezésében. A reakciókban alkalmazott bázis, a hidrogén-nyomás, az oldószer és a ligandumszerkezet hatását vizsgáltam a reakciók kimenetelére. A legsikeresebb ligandum alkalmazásával szubsztrátumok széles körét sikerült jó aktivitással és szelektivitással hidrogéneznem. Az előállított ligandumokkal kiváló optikai hozamot (98 % *ee*) sikerült elérni. A hidrogénezési reakciókat nagy szubsztrátum-koncentráció mellett végeztük, mely zöld kémiai és ipari szempontból is rendkívül előnyös.

-
- [1] (a) T. Niu, L.-X. Liu, B. Wu, Y. Zhou, *J. Org. Chem.*, **2023**, *12*, 7863–7871.
(b) J. Yu, J. Long, Y. Yang, W. Wu, P. Xue, L. W. Chung, X.-Q. Dong, X. Zhang, *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 690–693.
(c) J. Yu, M. Duan, W. Wu, X. Qi, P. Xue, Y. Lan, X.-Q. Dong, X. Zhang, *Chem. Eur. J.*, **2017**, *23*, 970–975.
(d) C. Yin, Y.-F. Jiang, F. Huang, *Nat. Commun.*, **2023**, *14*, 3718.

Kulcsszavak: aszimmetrikus hidrogénezés, Ir-katalizátor, P,N,O ligandum, keton

Kémia és Vegyipar II. tagozat

B konferencia-központ (2. tárgyaló)

9:00	Kiszl Abigél Blanka	Módszerfejlesztés SARS-CoV-2 vírus N-glikán profiljának analizéséhez kapilláris elektroforézissel	Auer Felícia, Dr. Guttman András
9:20	Szántó Anna	Biztonságos gyógyszerhasználat és fenntartható gyógyszerészet (ökofarmakovigilancia)	Dr. Maász Gábor, Dr. Maászné Zrínyi Zita
9:40	Benedek Szonja	Levegőszennyező komponensek akkumulációja és toxicitása a saláta- szárzöldi csiga táplálékhálózatában.	Dr. Hubai Katalin Eszter
10:00	Bischof-Weisz Dorottya	A globális klímaváltozás várható hatása az édesvízi zooplankton közösség szerveződésre, mennyiségi viszonyaira és diverzitására	Dr. Lengyel Edina, Dr. Boros Gergely

Tagozati zsűri

Elnök	Dr. Stenger Kovács Csilla
Tag	Dr. Jankovics Hajnalka
Tag	Szigeti Márton
Titkár	Molnárné Lakics Eszter

Módszerfejlesztés SARS-CoV-2 vírus N-glikán profiljának analíziséhez kapilláris elektroforézissel

*Készítette: Kiszl Abigél Blanka,
biomérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet,
Transzlációs Glikomika Kutatólaboratórium*

Témavezető: Auer Felícia, Dr. Guttman András

A COVID-19 járvány világszerte komoly egészségügyi és gazdasági kihívásokat és problémákat teremtett. A vírus terjedési mechanizmusának és az immunrendszer válaszána megértése elengedhetlen a hatékonyabb védekezés és terápia kidolgozásához. A glikán szerkezetek iránti érdeklődés az elmúlt években jelentősen megnőtt, azonban a Covid-19 járvány kezdete óta ez még inkább fokozódott, hiszen a koronavírus felszíni fehérjéin is megtalálhatóak ezek a struktúrák. A SARS-CoV-2 vírus folyamatosan mutálódik, ezáltal különböző variánsok jelennek meg világszerte. Az N- glikánok fontos részei a vírusoknak, mert ezek határozzák meg a terjedési mechanizmusukat és a fertőzőképességüket, így ezen fontos információk tudatában könnyebb a vírust vizsgálni a később kifejtett hatásai szempontjából. A szakirodalomban megjelent publikációk nagy része csak a rekombináns módon előállított tüskefehérje glikozilációjára terjed ki, ezért a kutatómunkám célja az UV-C sugárzás által inaktivált vírus glikozilációs profil meghatározásához szükséges módszer kidolgozása, mely a továbbiakban alkalmas nagy hatékonyságú kapilláris elektroforézissel történő elválasztáshoz. A módszer magában foglalja a tisztított vírusszuspenzió létrehozását nikkellel fedett mágneses mikrogyöngyök és a tüskefehérjék ellen termeltetett monoklonális ellenanyag segítségével, valamint a tisztított vírus szuspenzióból az N-glikánok felszabadítását. Ezt követően az N-glikánokat egy fluoreszcens festékkel APTS-sel jelölöm meg, majd kapilláris elektroforézis segítségével választom el a különböző struktúrákat egymástól, mely lézer indukált fluoreszcens detektorral kapcsolt. Az N-glikán profil feltérképezése segíthet azonosítani az adott vírus és mutációinak hatásait a vírus kötődésére és fertőző képességére, így a kutatás-fejlesztési munka során kidolgozott módszer hatékony eszköz lehet más vírusok felszíni fehérjéihez kötött N-glikánok meghatározására is.

Kulcsszavak: kapilláris elektroforézis, SARS-CoV-2, N-glikán profil

Biztonságos gyógyszerhasználat és fenntartható gyógyszerészet (ökofarmakovigilancia)

*Készítette: Szántó Anna,
vegyésmérnöki mesterképzési szak
Mérnöki Kar, Soós Ernő Kutató-Fejlesztő Központ*

Témavezető: Dr. Maász Gábor, Dr. Maászné Zrínyi Zita

Az ökofarmakovigilancia számos olyan alapvető tevékenységet foglal magában, amelyek célja a gyógyszermaradványok környezeti jelenlétének és káros hatásainak azonosítása, értékelése, megértése és mérséklése. Ez a kialakulóban lévő tudományág olyan paradigmaváltást jelent, amely a szennyezés forrásánál történő kontrollt helyezi előtérbe a hagyományos szennyezésmentesítéssel szemben. Sokrétű jellege magában foglalja a hatóanyagok teljes életciklusának nyomon követését, a kezdeti tervezéstől a gyógyszerfejlesztésen át a végső fogyasztásig.

Az ökofarmakovigilancia egy eredendően interdiszciplináris tudományterület, a gyógyszerészet, az orvostudomány, a környezettudomány, a biológia, az ökológia és a menedzsment metszéspontjában helyezkedik el. Kutatásomban a nemzetközi ökofarmakovigilanciai módszertanokba szeretnék betekintést nyújtani, tárgyalni és értékelni azok hatékonyságát és gyakorlati hasznosságát az alkalmazhatóság és a várható eredmények figyelembevételével. Ez az elemzés kiterjed a jövőbeni potenciális megoldások és a lehetséges korlátaik vizsgálatára is.

Dolgozatomban olyan következtetéseket és ajánlásokat fogalmaztam meg, amelyek erősítik az ökofarmakovigilanciai erőfeszítések hatékonyságát és előremozdítják a fenntartható gyógyszerészeti gyakorlatok átfogó célját.

Kulcsszavak: gyógyszermaradványok, ökofarmakovigilancia, fenntartható gyógyszerészet, környezeti kockázatelemzés

Levegőszennyező komponensek akkumulációja és toxicitása a saláta-szárzöldi csiga táplálékhálózatában

*Készítette: Benedek Szonja,
biomérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, Ökotoxikológiai Kutatócsoport*

Témavezető: Dr. Hubai Katalin Eszter

A mai 21. században az egyik legnagyobb problémát a levegőszennyezés okozza. A települések légszennyezettsége az egyik legfontosabb emberi egészséget befolyásoló tényező és emellett a környezetre is negatív hatást gyakorol. A közlekedésben különösképpen a dízelmotoros járművek által kibocsátott részecskék potenciálisan mérgező vegyi anyagok széles skáláját hordozzák, ide tartoznak a policiklusos aromás szénhidrogének (PAH). A légköri PAH-ok felhalmozódhatnak a növényekben, miközben a városi kertészkedés és a saját termesztésű zöldségek fogyasztása egyre népszerűbbé válik világszerte.

A kutatásom során laboratóriumi körülmények között kezelt saláta (*Lactuca sativa L.* tesztnövényeket alkalmazva megvizsgáltam, hogy a növények által akkumulált szennyezőanyag mennyiség milyen mértékben jelenik meg a táplálékhálózat következő szintjén, amit a mi esetünkben a spanyol csupaszcsiga (*Arion lusitanicus Mabilie.*) képviselt. Vizsgálataink során meghatároztuk a vizes aeroszol kivonattal kezelt saláták, valamint ezekkel a növényekkel táplált csupaszcsigák által akkumulált PAH mennyiségét. Megmértem a saláták fotoszintetikus pigment tartalmát, valamint a saláták és a csigák peroxidáz enzimaktivitásában bekövetkező változását.

Ezek a vizsgálatok hozzájárulhatnak az akkumulált PAH-ok további sorsának megértéséhez és az ökoszisztémák PAH szintjének meghatározásához, ami nagy jelentőséggel bírhat a populációkat érintő lehetséges kockázatok megértéséhez.

Kulcsszavak: policiklusos aromás vegyületek, biomonitorung, akkumuláció, enzimaktivitás, aeroszol

A globális klímaváltozás várható hatása az édesvízi zooplankton közösség szerveződésre, mennyiségi viszonyaira és diverzitására

*Készítette: Bischof-Weisz Dorottya,
környezettudomány mesterképzési szak
Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, Limnológia Kutatócsoport*

Témavezető: Dr. Lengyel Edina, Dr. Boros Gergely

A globális klímaváltozás napjaink egyik legsürgetőbb kihívása. Az Éghajlatváltozási Kormányközi Testület prognózisa alapján a szén-dioxid kibocsátás jelentős csökkentése nélkül bolygónk átlaghőmérséklete 3, vagy akár 5°C-al is emelkedhet az évszázad végére, melyre a sekély-tavi élőlényközösségek kifejezetten érzékenyen reagálhatnak. A zooplankton fontos eleme ezeknek a közösségeknek, egyebek mellett mert anyag- és energiaforgalmi hidat képez az elsődleges termelő szervezetek (algák) és a magasabb trofikus szintek (pl. halak) között. Vizsgálatunkban célul tűztük ki, hogy kimutassuk két felmelegedési forgatókönyv lehetséges hatásait a sekély tavi zooplankton közösségekre. A kísérletet 12 tartályból álló kültéri rendszerben (mezokozmosz rendszer) folytattuk le. A tartályokat három csoportra osztottuk (4 ismétlés/kezelés): kontroll/fűtetlen kezelés (K), illetve a kontrollnál 3 °C-kal (K+3), és 5 °C-kal magasabb hőmérsékletű (K+5) csoportokra. A kísérlet 8 hete alatt heti rendszerességgel vizsgáltuk a zooplankton közösséget (összetétel, egyedszám/biomassza, diverzitás) és napi rendszerességgel mértük a releváns abiotikus környezeti paramétereket (pl. hőmérséklet, foszfor- és nitrogén formák a vízben, beérkező fény intenzitása). A főkomponens analízis (PCA), a redundancia analízis (RDA), a két-mintás t-próbák és a varianciaanalízis (ANOVA) mind azt mutatták, hogy a kezelések szignifikánsan elkülönültek mind a környezeti paraméterek, mind pedig a közösségi metrikák alapján. Az NMDS (nem-metrikus skálázás) elemzés közösségi-összetétel változást is mutatott a kezelések között. A hőmérséklet emelkedése kedvező hatással volt a *Diaphanosoma* és a *Polyarthra* nemzetségek esetében, melyek egyedszáma jelentősen magasabb volt az emelkedett hőmérsékletű kezelésekben, mint a kontrollban. Ezzel szemben a *Keratella* nemzetség egyedszámára a hőmérséklet emelkedése negatív hatással volt: mind a K+3, mind a K+5 csoportban szignifikánsan alacsonyabb volt az egyedszámuk, mint a kontrollban. Az eredmények alapján arra következtethetünk, hogy a felszíni vizek hőmérsékletének várható emelkedése jelentősen befolyásolhatja az édesvízi zooplankton közösségek szerveződését és mennyiségi viszonyait, melynek komoly hatása lehet az ökoszisztéma egyéb tagjaira is.

Kulcsszavak: zooplankton, klímaváltozás, mezokozmosz-rendszer

Kémia és Vegyipar III. tagozat

C épület 206 Liszi-terem

9:00	Kovács Szilveszter	Elektrofermentáció alkalmazása illékony szerves zsírsavak előállítására	Koók László, Rózsenszki Tamás
9:20	Szarvas János Bernát	Az ionmegoszlás vizsgálata rés, hengeres és üreges pórusokban Donnan nagykanonikus Monte Carlo szimulációkkal	Dr. Boda Dezső, Dr. Valiskó Mónika
9:40	Janik Bence Botond	Agyagásvány - vegyes fém-oxid kompozitok előállítása és felületi tulajdonságaik	Vágvölgyi Veronika
10:00	Császár Kiara Atina	Bio-olaj észterezésének vizsgálata hierarchikus zeolit katalizátorokon	Dr. Miskolczi Norbert, Zsinka Viktória

Tagozati zsűri

Elnök	Dr. Kristóf Tamás
Tag	Dr. Nemestóthy Nándor
Tag	Dr. Jakab Miklós
Titkár	Dr. Sarkadi Zsófia

Elektrofermentáció alkalmazása illékony szerves zsírsavak előállítására

*Készítette: Kovács Szilveszter,
vegyésmérnöki mesterképzési szak
Mérnöki Kar, Bio-, Környezet- és Vegyészmérnöki Kutató Fejlesztő Központ,
Biomérnöki, Membrántechnológiai és Energetikai Kutató Csoport*

Témavezető: Koók László, Rózsenberszki Tamás

Az illékony szerves zsírsavak (angolul: volatile fatty acid, VFA) (pl.: ecetsav, propionsav és vajsav) az élelmiszer- és gyógyszeripartól kezdve a műanyaggyártásig széles körben használt alapvető kémiai építőelemek közé tartoznak. Előállításuk eltérő attól függően, hogy mi a célvegyület és az milyen iparágban kerül felhasználásra, azonban két fő gyártási metódus van: a petrokémiai származékok feldolgozása és a szerves anyagok biokonverziója. [1]

Napjainkban egyre fontosabbá válik a fenntarthatóság és a fenntartható fejlődés. A VFA-k anaerob fermentációval való előállítása jelenleg csak kis részét fedezi az ipari felhasználásnak, azonban ennek az eljárásnak a javításával a fosszilis alapanyagok felélését csökkenthetjük. Emellett, idén a tervek szerint hazánkban bevezetésre kerülő biohulladék (pl.: konyhai hulladék) külön gyűjtése és ezáltal szubsztrátként történő fermentációs kezelése ígéretes lehetőséget rejt a VFA-k biológiai előállítására [2].

A fermentáció javítására egy újszerű technika az elektrofermentáció, mely során a lebontó mikroorganizmusok metabolizmusát befolyásoljuk elektrokémiai úton [3]. A reaktorba helyezett elektródok közti potenciálkülönbség következtében többlet redukáló erő biztosítható a sejtek számára, így hatással lehetünk azok anyagcserefolyamataira.

Ebben a dolgozatban azt vizsgáltam, hogy a korábbi modellrendszerekben ígéretesnek bizonyuló elektrofermentáció milyen hatással van valódi konyhai hulladék és rothasztott szennyvíziszap anaerob fermentációs folyamataira. Az eredmények alapján elmondható, hogy az elektrofermentáció ígéretes stratégia a VFA termelés intenzifikálására.

[1] Agnihotri, S., Yin, D. M., Mahboubi, A., Sapmaz, T., Varjani, S., Qiao, W., ... & Taherzadeh, M. J. (2022). A glimpse of the world of volatile fatty acids production and application: a review. *Bioengineered*, 13(1), 1249-1275.

[2] Januártól Elindul a Konyhai zöld- és élelmiszerhulladék Házhöz Menő Gyűjtése is. MOHU. (n.d.). <https://mohu.hu/media/hirek/januartol-elindul-a-konyhai-zold-es-elelmiszerhulladek-hazhoz-meno-gyujtese-is.html>

[3] Moscoviz, R., Toledo-Alarcón, J., Trably, E., & Bernet, N. (2016). Electro-fermentation: how to drive fermentation using electrochemical systems. *Trends in biotechnology*, 34(11), 856-865.

Kulcsszavak: Elektrofermentáció, konyhai hulladék, VFA

Az ionmegoszlás vizsgálata rés, hengeres és üreges pórusokban Donnan nagykanonikus Monte Carlo szimulációkkal

*Készítette: Szarvas János Bernát,
vegyésmérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Természettudományi Központ,
Komplex Molekuláris Rendszerek Kutatócsoport*

Témavezető: Dr. Boda Dezső, Dr. Valiskó Mónika

A dolgozat célja olyan elektrolitok modellezése, amelyek valamilyen pórusos anyagba adszorbeálódnak. A pórus kifejezést itt általánosan értem, azaz a geometria lehet különböző aszerint, hogy milyen szimmetriával rendelkezik a rendszer. (1) Síkgeometria esetén résről beszélünk, ahol két párhuzamos sík fal határolja a bezárt elektrolitot; (2) henger- szimmetria esetén pórusról vagy csatornáról beszélünk, amikor egy henger alakú pórus határolja az elektrolitot; (3) gömbszimmetria esetén üregről beszélünk, amikor egy gömbfelület határolja a rendszert. A pórusok falán töltéseket helyezhetünk el, ezáltal a pórus az ellenionra szelektív válik. A pórusban lévő elektrolit termodinamikai egyensúlyban van egy tömbfázisú elektrolittal, aminek a dielektromos állandója ($\epsilon=80$) rögzített. A pórusban az elektrolit egy inhomogén rendszert alkot, ahol a pórusfalak mellett elektrokémiai kettősrétegek alakulnak ki. Ezek szerkezetét befolyásolja a rendszer paraméterei. A pórusban ugyanakkor kisebb lehet a dielektromos állandó, mint a tömbfázisban, emiatt az ionoknak egy szolvatációs energiagátat kell leküzdeniük, amikor bediffundálnak a pórusba. Ennek következtében az ionok koncentrációja kisebb lesz a pórusban, mint a tömbfázisban. Ez tulajdonképpen egy Nernst-féle megoszlás a két részrendszer között. Mivel a pórusban és a tömbfázisban különbözőek az elektromos viszonyok (különböző ϵ , töltött fal), az egyensúlyt Donnan egyensúlynak nevezzük. Ez lép fel akkor is, amikor a rendszert egy féligáteresztő membrán választja el egymástól (nem-ozmotikus membránegyensúly).

A pórusban az elektrolit egy inhomogén rendszert alkot, ahol a pórusfalak mellett elektrokémiai kettősrétegek alakulnak ki. Ezek szerkezetét befolyásolja a rendszer paraméterei. A (1) rendszer geometriája, (2) a pórus dielektromos állandója, (3) a pórus mérete, (4) a pórus falán lévő felületi töltéssűrűség, (5) az elektrolit koncentrációja. Az ionokra és a pórusokra egyszerű modelleket alkalmaztam, amiket a D-GCMC (Donnan- Grand Canonical Monte Carlo) számítógépes szimulációs módszerrel vizsgáltam. [1.] Ezt a módszert témavezetőm és Dirk Gillespie fejlesztette ki tömbfázisra, és az elsők között alkalmaztam inhomogén rendszerekre. Azt találtam, hogy (1) a pórus méretének csökkentésével a pórusban csökkenni fog az anion és a kation koncentrációja, de az anioné jobban, amennyiben a fal negatívan töltött. (2) A pórus geometriája nagy hatással van az eredményekre, azaz pórusban erősebb lesz a kettősrétegek átlapolódása és az anionok kizárása, mint a résben. Hasonlóan erősebb lesz üregben, mint pórusban. Mindkét effektus javítja az anionok kizárását és a szelektivitást.

[1] D. Boda and D. Gillespie. Distribution of ions between different dielectric media: Direct simulation of the Donnan equilibrium in the grand canonical ensemble. *J. Mol. Liq.*, 391:123372, 2023.

Kulcsszavak: molekuláris szimuláció, Donnan egyensúly, nagykanonikus Monte Carlo, dielektromos állandó, felületi töltéssűrűség

Agyagásvány - vegyes fém-oxid kompozitok előállítása és felületi tulajdonságaik

*Készítette: Janik Bence Botond,
anyagmérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, Analitikai Kémia Kutatócsoport*

Témavezető: Vágvölgyi Veronika

Mai világunkban jelentős probléma vizeink szennyezettsége. A vizek tisztítása nehéz folyamat, különös képpen a tisztítási folyamat során hátramaradó szerves szennyezők miatt. Ezek a szennyezők eltávolítása extra lépéseket követel, amire környezetbarát megoldást jelenthetnek a természetes forrásból származó agyagásvány katalizátorok. A halloysit és kaolinit jelentős mennyiségben kerül felhasználásra ipari területeken, aminek háttérben kedvező kémiai, illetve fizikai tulajdonságai állnak akár fejlesztési alapként való használatra is.

Kutatásom célja, hogy egy korábban elkezdett munkában meghatározott felületmódosító fém-oxid arány mellett (10% CuO – 90% ZnO) az optimális halloysit-felületmódosító arányt meghatározzam. Ehhez különböző arányú halloysit adagolást alkalmaztam (30% - 40% - 50% - 60%) A felhasznált anyagrendszer halloysit hordozóra felvitt ZnO/CuO vegyesoxid felületmódosító. A vegyesoxid kialakítása közvetlenül a halloysit felületén történt meg csapadékképzéses eljárással nitrát prekursor sókból lúgos közegben.

Munkám során különböző összetételben állítottam elő katalizátorokat, valamint az elkészült minták fotokatalitikus aktivitását kumarin gyökbefogó segítségével emissziós spektrofotométerrel, termikus stabilitását termogravimetriával, a preparátum tisztaságát, valamint a tervezett vegyesoxidok kialakulását röntgendiffrakcióval és a kompozitok fajlagos felületét nitrogén-abszorpciós (BET) módszerrel mértem.

Kísérletet tettem az optimális összetételű halloysit-vegyesoxid rendszer meghatározására, ahol a célfüggvény nem csak a nagyobb bontási hatékonyság, de a jobb pórusszerkezet, és oxid diszperzitás.

Kulcsszavak: Halloysit, fotokatalízis, cink-réz vegyes-oxid

Bio-olaj észterezésének vizsgálata hierarchikus zeolit katalizátorokon

*Készítette: Császár Kiara Atina,
vegyésmérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Bio-, Környezet- és Vegyésmérnöki Kutató-Fejlesztő Központ,
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék*

Témavezető: Dr. Miskolczi Norbert, Zsinka Viktória

A világ energiaigénye folyamatosan növekszik, miközben a fosszilis energiahordozó készlet és annak gazdaságos elérhetősége csökken. Más részről az életszínvonal és a lakosság növekedése következtében a különböző eredetű hulladékok mennyisége jelentősen növekszik. Ezen kihívásokra jelenthetnek alternatív megoldást a hulladékok termokémiai úton, pl. pirolízissel történő feldolgozása. A pirolízis egyik terméke bio-olaj, ami minőségjavítás nélkül nem alkalmas alternatív motorhajtó anyagként történő felhasználásra. A bio-olaj ugyanis jelentős mennyiségű aldehidet, ketont, alkoholt, karbonsavat és egyéb, a további felhasználást károsan befolyásoló vegyületet tartalmaz. Ezek közül a karbonsavak jelentik a legnagyobb problémát, mert savas karakterük miatt jelentősen rontják a bio-olaj korróziós tulajdonságait. A karbonsavak mennyisége alkoholokkal történő észterezéssel csökkenthető. Az észterezési reakcióknál alkalmazott szervesetlen sav katalizátorok a bio-olaj esetében további nehézségeket okoznak. Erre a problémára adhat megoldást a zeolitok alkalmazása. A zeolitok nagy Si/Al arány esetében kellő savassággal rendelkeznek az észterezési reakciók nagyobb konverzióval történő lejárásának elősegítésére.

TDK munkám során hosszú szénláncú karbonsav elegy észterezését vizsgáltam Y-zeolit és Co/Y-zeolit katalizátorokon. Megvizsgáltam a katalizátorok Si/Al arányának és átmenetifém tartalmának lejárásodó reakciókra gyakorolt hatását. A Y-zeolit katalizátorok felületére nedves impregnálással kobaltot vittem fel. Vizsgáltam a lejárásodó folyamatok időbeliségét, melyeket klasszikus analitikai módszerekkel és FTIR spektroszkópia segítségével követtem nyomon..

Kulcsszavak: bio-olaj, észterezés, zeolit katalizátor, minőségjavítás

Műszaki tagozat

B konferencia-központ (nagy előadó)

9:00	Kis-Iván Alex	Szintézisgáz előállítása mechano-kémiaiilag aktivált kaolint és átmenetifémet tartalmazó katalizátorokkal	Dr. Miskolczi Norbert
9:20	Zelenka Zsófia	Műanyag kávékapszulák újrahasznosíthatóságának vizsgálata	Dr. Simon-Stöger Lilla Rita Dr. Varga Csilla
9:40	Fricz Balázs	Hőáram becslése és hőátszármaztatási tényezők modell-alapú identifikálása szakaszos üvegreaktoron végzett mérésekkel	Dr. Nagy Lajos
10:00	Katona Ramóna	Vörösiszapból előállított agyagtégla szilárdságának növelése korund gömbhéj felhasználásával	Dr. Jakab Miklós

Tagozati zsűri

Elnök	Dr. Korim Tamás
Tag	Dr. Takács-Bárkányi Ágnes
Tag	Dr. Nagy Roland
Titkár	Horváth Dominik

Szintézisgáz előállítása mechano-kémiaailag aktivált kaolint és átmenetifémet tartalmazó katalizátorokkal

*Készítette: Kis-Iván Alex,
vegyésmérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Bio-, Környezet- és Vegyésmérnöki Kutató-Fejlesztő Központ,
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék*

Témavezető: Dr. Miskolczi Norbert

Az iparban számos helyen alkalmaznak zeolit katalizátorokat, többek között a katalitikus hidrogénezésnél és a fluid katalitikus krakkolás során. A katalizátorok mesterséges előállításáról nagyszámú szakirodalom áll rendelkezésre. Más részről viszont energetikai, környezetvédelmi és fenntarthatósági kérdések miatt egyre inkább felértékelődnek a természetes eredetű katalizátorok, vagy a természetes anyagok módosításával előállított katalizátorok. Ilyen természetes anyag lehet a kaolin is. A kaolin a természetben előforduló anyag, melynek egyik fő komponense a kaolinit. A kaolinit szilíciumot és alumíniumot tartalmaz, hasonlóan a mesterségesen előállított zeolit katalizátorokhoz. Emiatt a kaolinból megfelelő eljárással zeolit szerkezet is kialakítható. Ez az eljárás költséghatékonyabb a szintetikussal zeolitokkal szemben, valamint környezetre gyakorolt káros hatása jelentősen alacsonyabb. A katalizátorok aktivitása azok szerkezetének módosításával tovább javítható. Számos szakirodalmi hivatkozás foglalkozik a katalizátorok felületi és egyéb jellemzőinek módosításával. Az egyik ilyen lehetőség a katalizátorok szerkezetébe kisméretű részecskék beépítése.

TDK munkám során módosított zeolit katalizátorokat állítottam elő, illetve vizsgáltam azok alkalmazhatóságát mezőgazdasági biomassza elgázosítása során. Ezek a módosított katalizátorok nemcsak a hagyományos zeolitok alkalmazási területein, hanem olyan területeken is hatékonyak lehetnek, ahol korábban csak korlátozottan alkalmazták őket. Az ilyen katalizátor-rendszerek előnyösek lehetnek például a hulladék alapú eljárásokban, a nagy hozzáadott értékű szénhidrogénipari technológiákban, vagy a szén-dioxid kibocsátását csökkentő CCU/CCS eljárásokban. A katalizátor előállítása során a mechano-kémiaailag módosított kaolint, illetve mesterségesen előállított ZSM-5 zeolit katalizátort alkalmaztam.

Elsősorban a katalizátorok morfológiájának, szerkezetének és összetételének nagy szintézisgáz-tartalmú anyagáramok előállítására gyakorolt hatását vizsgáltam. A nagyobb szintézisgáz hozam érdekében a katalizátorok felületére nedves impregnálással nikkelt vittem fel.

Kulcsszavak: szintézisgáz előállítás, kaolin, zeolit, mechanokémiai aktiválás, nikkelt

Műanyag kávékapszulák újrahasznosíthatóságának vizsgálata

*Készítette: Zelenka Zsófia,
vegyésmérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Bio-, Környezet- és Vegyésmérnöki Kutató-Fejlesztő Központ,
Fenntarthatósági Megoldások Kutatólaboratórium*

Témavezető: Dr. Simon-Stóger Lilla Rita, Dr. Varga Csilla

Napjainkban a kávékapszulák felhasználása rohamosan nő, így az abból keletkező hulladék mennyisége is jelentős. A kávékapszulák több típusú műanyagból tevődnek össze, a kapszula rész általában polipropilén, míg a fólia részt polietilén-tereftalát. Ebből adódóan a kávékapszulák újrahasznosítása nagy volumenű és rendkívül nagy komplexitású feladat.

A kávékapszulák műanyagjainak fizikai szeparációját és tisztítását követően hengerszéken mesterkeverékeket készítettem kísérleti fejlesztésű olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú adalékanyagok bekeverésével. A kompatibilizáló adalékok alkalmazása elengedhetetlen a hulladék alapú rendszerek mechanikai stabilitása céljából. A mesterkeverék alapja kereskedelmi polipropilén volt, mert annak összetétele ismert, így nem jelenik meg változóként az újrafeldolgozott műanyagban a későbbiekben.

A mesterkeverékek szerkezeti vizsgálatát Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiával végeztem. Az elkészített mintákat oszcillációs nyíróreométeren vizsgáltam, elsőként amplitúdó pásztázást végeztem a lineáris viszkoelasztikus tartomány meghatározása céljából, melynek eredménye a mesterkeverékek szerkezeti erősségéről nyújtott elsődlegesen információt. Továbbá méréseket végeztem kapilláris reométeren, illetve a minták folyásindex (MFI) értékét is meghatároztam. Utóbbi az egyik legelterjedtem módszer a műanyagok minősítésére, így alkalmam lesz összehasonlítani mintáimat más polimerekkel és műanyagokkal is.

Kulcsszavak: kávékapszula, oszcillációs nyíróreométer, FT-IR, mechanikai újrahasznosítás

Hőáram becslése és hőátszarmaztatási tényezők modell-alapú identifikálása szakaszos üvegreaktoron végzett mérésekkel

*Készítette: Fricz Balázs,
vegyésmérnöki mesterképzési szak
Mérnöki Kar, Bio-, Környezet- és Vegyésmérnöki Kutató-Fejlesztő Központ
Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék*

Témavezető: Dr. Nagy Lajos

A modern vegyipari termelés követelményei közé tartozik a termék meghatározott minőségének fenntartása, a természetre káros melléktermékek mennyiségének csökkentése és a veszélyes üzemelési állapotok elkerülése. A felsorolt elvárások lehető legnagyobb mértékű betartása nagy jelentőséggel bír minden vegyipari ágazatban, például kiemelhető a gyógyszeripar (a termékek emberi egészségre gyakorolt hatása miatt) valamint az olajipar és petrokémia.

Ezen elvárások betartása érdekében az ipar modelleket hoz létre, melyek egyszerűsített és jól definiált leképezései a valós rendszereknek. Ezeket a modelleket szükséges validálni valós mérési adatokkal, hogy ellenőrizhető legyen, biztosan az elvárt pontossággal képezik-e le a rendszert, esetleg már a modell paramétereinek meghatározásához is szükségesek lehetnek a mérési eredmények.

A modellek megalkotása során sokféle tulajdonság lehet a vizsgálandó jellemző, köztük például a fizikai-kémiai változásokat kísérő hőáramok. Jelen munka során egy reaktorban lejátszódó jelenségek hőáramát modelleztem. Ezt a Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék üvegreaktorán végeztem el, a rendszer hőmérlegének megalkotásával és annak módosításával.

A munka során először áttekintettem a kalorimetriás rendszerek és reaktorok hőtani modellezésére vonatkozó szakirodalmat. Ezt követően a reaktor hőmérlegének, valamint a mérlegen belül a hőátszarmaztatási tényező módosításával és identifikálásával képeztem le a rendszert, majd értékeltem minden esetben a modellt. A kész modell jól meghatározta a bevitt hőáramot, a reaktorhoz kapcsolva pedig létrejött egy on-line hőáram identifikáló rendszer.

A modell gyakorlati validálását egy oldási és kristályosítási ciklus (amely gyenge hőszínezetű folyamat) mérési adatainak felhasználásával végeztem el. A modell által kapott hőáramok alapján jól követhető volt az oldódás és a kristályosodás menete.

Kulcsszavak: modellezés, hőáram, kristályosítás, hőátszarmaztatási tényező

Vörösiszapból előállított agyagtégla szilárdságának növelése korund gömbháj felhasználásával

*Készítette: Katona Ramóna,
vegyésmérnöki alapképzési szak
Mérnöki Kar, Műszaki Tudományok Kutató-Fejlesztő Központ,
Anyagmérnöki Intézeti Tanszék*

Témavezető: Dr. Jakab Miklós

A timföldgyártás egyik mellékterméke a vörösiszap, aminek újrahasznosítása komoly kihívást jelent. Magyarországon különösen fontos e probléma megoldása, hiszen ez, a 2010-es vörösiszap-katasztrófa során a legnagyobb mennyiségben jelenlévő hulladék. TDK kutatási munkám során egy megfelelő mechanikai tulajdonságokkal rendelkező téglaiipari terméket kívánok létrehozni, aminek másodlagos alapanyaga a vörösiszap.

A Pannon Egyetem, Anyagmérnöki Intézeti Tanszéke az elmúlt időben többféle kísérletet tett a vörösiszap felhasználhatóságára vonatkozóan, annak érdekében, hogy a felhalmozott hulladék mennyiségét csökkenteni lehessen. Ezeket a munkákat folytatva egy új összetételben vizsgáltam a téglák mechanikai tulajdonságait korund gömbháj felhasználásával, ami egy pórusképző adalék. Ennek tulajdonsága nem változik 800-1000 °C-on történő hőkezelés hatására sem, így megfelelő hővezetőképességgel és mechanikai szilárdsággal rendelkező téglá állítható elő.

Az elkészített építőipari termékeket a száradási/égetési zsugorodás, vízfelvétel, látszólagos porozitás és testsűrűség, valamint a hajlító- és nyomószilárdság számításával minősítettem. A termikus tulajdonságokat hevítőmikroszkópos vizsgálattal és termogravimetriával vizsgáltam. Ezenfelül képalkotó eljárásokat (EDS/SEM/CT), röntgendiffrakciós fázisanalízist (XRD) végeztem. A téglák környezeti igénybevételekkel szembeni ellenállóképességét klímakamrás vizsgálatokkal ellenőriztem.

A fentebb említett vizsgálati módszerek alkalmasak voltak arra, hogy birtokában legyenek azon eredményeknek, amelyekkel minősíteni tudom a kísérleti munka során előállított próbatesteket.

Kulcsszavak: vörösiszap, téglá, korund

