

## **Arany(I)-tartalmú óriásmolekulák**

***Témavezetők: Marsi Gábor és Oláh Laura***

*MTA Természettudomány Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet*

Az arany az emberek többsége számára egy misztikus elem, hiszen végigkísérte az emberi civilizációt, miközben köréje mítoszok szövődtek, és a szépség, a gazdagság, a halhatatlanság jelképévé vált. Az alkimisták is az arany bűvkörébe kerültek, keresték a bölcsek követ, melytől azt remélték, hogy minden közönséges anyagot az örök és tökéletes fémmé, azaz arannyá tud változtatni. Évszázadok teltek el, mire az arany a modern gyógyászat része lett, és az aranyvegyületek a reumás ízületi gyulladás, az asztma és a bőr bizonyos autoimmun betegségeinek a kezelésében is felhasználást nyertek.

A Szupramolekuláris Laboratóriumban olyan több száz atomból álló óriásmolekulákat állítunk elő, melyekbe az aranyat koordinatív kötésekkel építjük be. Az előállított óriásmolekulák háromdimenziós szerkezetét röntgendiffrakcióval határozzuk meg. A lumineszcens-, katalitikus- és redox-aktív aranyak az óriásmolekulába történő beépítésével előállított új anyagok sokkal értékesebbek bármilyen nemesfémmel, és a nanotechnológia, a kémiai technológia, az elektronika, stb. területén nyerhetnek felhasználást. A nyári kutatótáborba jelentkezők közül azokat a „kíváncsi kémikusokat” várjuk, akik szívesen megismerkednének az aranytartalmú vegyületek kémiájával, és szeretnének preparatív kémiai labormunkát végezni. Azt nem ígérhetjük, hogy együtt megfejtjük az aranycsinálás titkát, de számos aranytartalmú óriásmolekulát állítunk majd elő, és a kutatótábor végén együtt gyönyörködünk majd vegyületeink háromdimenziós szerkezetében.

## **Egy új szerves molekula előállítása és jellemzése**

***Témavezetők: Ábrányi-Balogh Péter és Szilágyi Bence***

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet*

Az intézet Gyógyszerkémiai Laboratóriumában több évtizede foglalkozunk olyan heterociklusos vegyületek előállításával, amik várhatóan jótékony hatással bírnak az emberi szervezetre és így gyógyszerként felhasználhatók. A kutatótábor alatt bepillantást engedünk egy ilyen vegyület előállításába. A keletkező vegyület szerkezetét igazolnunk is kell, amit különböző modern analitikai módszerekkel végzünk (NMR, IR, MS).

A táborba olyan érdeklődőket várunk, akiket érdekel a laboratóriumban végzendő kísérleti munka és szeretnek különböző vegyszerekkel dolgozni. Az előállított vegyületet a reakció elegyből izoláljuk, azaz elkülönítjük a keletkezett melléktermékektől. A tisztításhoz kromatográfiás tisztítási módszereket (vékonyréteg kromatográfia, oszlop kromatográfia) használunk.

Lehetőséget biztosítunk különböző spektroszkópai mérések megismerésére és végrehajtására, amikkel a keletkező vegyület szerkezetét bizonyítani tudjuk.

## **Érzékelők a bolt polcáról – Természetes szenzorok**

*Témavezetők: Pávai Mária és Paszternák András*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

A kutatótábor elején vásárolni indulunk, kosarunkat bolti termékekkel (cellofán, zselatin, pamut anyag, hidrogél dekorációs gyöngy és falfesték) töltjük meg, melyekből érzékelő felületeket fogunk kialakítani. Beugrunk a piacra is, hogy a vizsgálatainkhoz szükséges őrölt kurkumát, sáfrányt, céklát, répát, paprikát, narancsot, citromot és grapefruitot beszerezzük.

A cellofánon alapuló érzékelő felületeket hozunk létre, majd UV-VIS spektrofotométerrel és atomi erőmikroszkóppal (AFM) jellemezzük azokat. Összehasonlítjuk érzékenységüket a természetes és mesterséges élelmiszerszínezékekre.

A kutatóhét második felében kurkuminnal (természetes indikátor) színezett szenzor felületekkel foglalkozunk. Megvizsgáljuk a kémhatás változására érzékeny - sajátkészítésű - tesztcsíkokat, szárított kapszulákat, textildarabokat, hidrogéleket és falfestékeket. Élelmiszeripari és egészségügyi modell-rendszereken végzünk kísérleteket. Az adatgyűjtéshez és az eredmények érkeeléséhez segítségül hívjuk az okostelefont.

A témát választó táborozók közreműködhetnek egy újonnan indult tudomány-népszerűsítő Facebook-oldal, a Science of Curcumin szerkesztésében is.

# Fluoreszcens jelzővegyületek szintézise

*Témavezetők: Eördög Ádám és Kormos Attila*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet*

Számos biológiai képalkotó eljáráshoz és orvosbiológiai diagnosztikai módszerhez elengedhetetlenek a megfelelő fluoreszcens jelzővegyületek. A Kémiai Biológia Kutatócsoport egyik fő kutatási területe ilyen jelzővegyületek előállítása. Ezeknek a vegyületeknek megfelelő spektrális tulajdonságokkal, stabilitási jellemzőkkel kell rendelkezniük, továbbá fontos, hogy szelektíven és gyorsan kapcsolhatók legyenek egy – gyakran az élő szervezetekben előforduló – másik kívánt molekulához.

Kifejlesztettünk két ilyen vegyületet, meghatároztuk az előállításuk módszereit. További modellkísérleteket szeretnénk végezni, melyhez az anyagok előállítását ismét el kell végezni. Az egyhetes tábor ideje alatt a diákok ezen vegyületeket fogják ismételtelen előállítani.

Olyan diákok jelentkezését várjuk, akik szívesen megismerkednének a modern szerveskémiai szintézis eszközeivel, és szívesen dolgoznának színes és fluoreszkáló anyagokkal. Az ide érkezőknek lehetősége lesz kipróbálni szerkezetvizsgálati eszközöket is.



fluoreszkáló oldatok



csendélet a fülkében

# **Gépkocsikban használt hidrogén tüzelőanyag-cellák felépítése**

*Témavezetők: Gubán Dorottya és Szabó Ervin*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

A megújuló energiaforrások egyre növekvő mértékű alkalmazása napjaink legnagyobb kihívásai közé tartozik. A hidrogén mint üzemanyag közvetve előállítható bármelyik megújuló energiaforrásból. Az elsődleges energiaforrásokat először elektromos energiává alakítjuk, majd az elektromos energiát a víz elektrolízisén keresztül hidrogénné. Ezután a hidrogént könnyedén és nagy hatásfokkal tudjuk visszaalakítani hővé vagy elektromos energiává a felhasználni kívánt helyen.

Ez utóbbi átalakításra a legalkalmasabb berendezések a hidrogén tüzelőanyag-cellák. Ezeknek egyik nagy előnye a mobilitás, ezért alkalmazhatók például járművek meghajtásában is, amint azt a Toyota FCV gépkocsi is bizonyítja. Nagy hátrányuk viszont a drága Pt katalizátor, ami megemeli a termék árát. Célunk olyan katalizátor fejlesztése, amelynek jelentősen alacsonyabb a nemesfém tartalma anélkül, hogy ez csökkentené az aktivitását.

A kutatási feladat elég sokrétű lesz: (i) elektrokatalizátorokat állítunk elő mind a katód mind az anód oldalra; (ii) ciklikus voltammetria vizsgálatokban minősítjük az elektrokatalizátorokat; (iii) membrán - elektród együtteseket tervezünk és állítunk elő ; (iv) hidrogén tüzelőanyag-cellában vizsgáljuk a kész membrán - elektród együtteseket.

A kísérletező feladata a fenti munkák kivitelezése lesz. Várjuk azon jelentkezőket, akiket vonzanak a preparatív feladatok, valamint az elektrokatalitikus folyamatok megismerése.

# Hogyan épül fel a sejtmembrán? Egyszerű modellek előállítása és vizsgálata

*Témavezetők: Mihály Judit és Keszthelyi Tamás*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezatkémiai Intézet*

Az élő sejtek citoplazmáját sejtmembrán veszi körül, egy olyan szelektíven áteresztő határoló réteg, mely fizikailag elválasztja a sejten belüli alkotókat a sejten kívüli környezettől, azonban lehetővé teszi a környezettel való anyag- és információcserét. A sejtmembrán felépítésének és működésének minél pontosabb megértése elengedhetetlen ahhoz, hogy a sejtben zajló folyamatokat ellenőrizni, és szükség esetén célirányosan befolyásolni tudjuk, vagyis, hogy pontos diagnosztikai, és mellékhatásoktól mentes, minimális hatóanyagot igénylő terápiás eljárások legyenek kidolgozhatók.

A sejtmembrán alapját az elsősorban foszfolipidekből álló kettősréteg alkotja, és ehhez kapcsolódnak a membrán funkcionális egységei: a fehérjék és szénhidrátok. Kutatásaink során a sejtmembránok egyszerű modelljeként szolgáló, különböző összetételű foszfolipid szerveződések alapkutató szintű vizsgálatával foglalkozunk. Vizes oldatban a foszfolipidek spontán önszerveződéssel háromdimenziós képződményeket - micellákat és vezikulákat - alkotnak, míg a víz/levegő határfelületen kétdimenziós szerveződések - monorétegek - alakulnak ki. A víz/levegő határfelületről a monoréteg átvihető szilárd hordozóra, amelyen egy újabb monoréteg felvitelével kettősréteg alakítható ki. Az itt említett természetes és mesterséges két- és háromdimenziós lipid szerveződések modellül szolgálnak a sejtmembrán működésének megértéséhez, valamint liposzómás gyógyszerhordozók és bioszenzorok tervezéséhez.

A kutatótábori munka keretében az érdeklődő diákok lipid monorétegeket és kettősrétegeket fognak készíteni. A lipid szerveződések szerkezetét és kölcsönhatásait műszeres eljárásokkal fogják vizsgálni. Ezt a témát, melynek során egy biológiai eredetű és elsősorban biokémiai jellegű problémát modern fizikai-kémiai módszerekkel tanulmányozunk, széles érdeklődési körrel rendelkező diákok számára ajánljuk. A témán előreláthatólag két diák fog dolgozni, érdeklődés szerint akár eltérő mélységben vizsgálva a probléma biokémiai, illetve műszeres, fizikai oldalát.

# Hogyan hat az oldószer a különböző típusú festékek abszorpció és emissziós színeképeire?

*Témavezetők: Demeter Attila és Illés Ádám*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

A festékek színe attól függ, hogy az anyag a látható színekép mely hullámhossz tartományában nyeli el (illetve reflektálja) a beeső fényt. A kiváltott érzetet tovább módosíthatja, ha a molekulánk jelentős mértékben lumineszkál is. E tulajdonságokat az abszorpció és emisszió színeképek segítségével lehet leírni. A festék molekula környezete (esetünkben pl. az oldószer) módosíthatja a színeképeket és így színérzetünket is.

Két különböző hatást, a polaritást és a hidrogénhidkötő képességet fogjuk vizsgálni két különböző festék segítségével: az egyik egy semleges, de meglehetősen poláros molekula, a 4-ciano-4'-dimetilamino-sztilbén, míg a másik egy ionos bétain, a Reichardt's dye lesz. Ezek eltérő viselkedését próbáljuk numerikusan is leírni és értelmezni. Az oldószerek közül először különböző polaritású nem protikus oldószereket használunk, majd ezek közül egy-két célszerűen kiválasztotthoz a festékünk jelenlétében erősen hidrogénhid-kötő alkoholt adagolunk növekvő mennyiségben. A színeképek változása alapján megkísérlünk egy általánosabb leírást adni a jelenségről.

## **Liposzómás gyógyszerhordozó rendszerek**

*Témavezetők: Szigyártó Imola Csilla és Nagyné Naszályi Livia*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

Az utóbbi évtizedekben az új hatóanyagok felfedezése mellett fontos szerepet kap a korábbról már ismert hatóanyagok újraformulálása, melynek célja a hatékonyabb gyógyszerbejuttatás kevesebb mellékhatással. A nanohordozóba zárt hatóanyag a célszövethez érkezésig nem érintkezik a szervezettel, így a bomlékony molekulák megóvhatók, valamint a toxikus molekulák nem károsítják az egészséges szöveteket. Célzott hatóanyag-bejuttatás alkalmazásával kisebb mennyiség is elegendő a hatóanyagból, mivel jobban hasznosul. Ez a szervezet terhelését csökkenti, így csökkennek a mellékhatások is. A liposzómák mint nanohordozók egyszerűen előállíthatók a sejtfalat is alkotó lipidekből (pl. 1,2-dipalmitoil-*sn*-glicero-3-foszfatidil-kolin, DPPC) kihasználva önrendező tulajdonságukat. Liposzómás rákellenes készítményt már sikerrel alkalmaznak daganatellenes terápiában.

Kutatómunkánk során azt vizsgáljuk meg a hallgatókkal, hogy különböző színes hatóanyagok milyen módszerrel tölthetők be hatékonyan liposzómákba.

DPPC alapú liposzómákat állítunk elő, majd pH gradienst alkalmazva különböző hatóanyagokkal töltjük meg a nanohordozókat. Vizsgáljuk a hatóanyag-bezárás hatását a liposzómák szerkezetére differenciális pásztázó kalorimetriával ( $\mu$ DSC), Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiával (FTIR) és kisszögű röntgenszórással (SAXS). A növényi hatóanyagok bezárását, stabilitásuk megőrzését és kioldódásukat ultraibolya-látható spektroszkópiával fogjuk vizsgálni. Azon hallgatók jelentkezését várjuk, akik szívesen fejlesztik kezűességüket (analitikai mérlegen való bemérés, automata pipetta használat, mintabetöltés kapillárisba stb.), de fogékonyak a mérőműszerek működésének megismerésére is, hiszen nagyműszerek használatába is betekinhetnek.



## Lumineszcens molekulák előállítása

*Témavezetők: Fegyverneki Dániel és Molnár Dániel*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet*

A lumineszcencia („hideg fény”) jelensége a 21. századra szinte észrevétlenül beépült mindennapi életünkbe. A különböző színekben pompázó LED fényforrások, a foszforeszkáló jelzések már nem tartanak számot különleges figyelemre. Azonban a fényt kibocsátó élőlényeket, mint például a szentjánosbogár, mind a mai napig lenyűgözve figyeljük, nem is sejtve, hogy a fényjelenség, amit látunk, ugyanazon az elven működik, mint egy egyszerű fényforrás esetében.

A lumineszcencia jelenségét számos módon előidézhethetjük, a fény létrejöhet elektromosság, mechanikai hatás, UV-fény, vagy akár kémiai reakció hatására. A közösen eltöltött hét során megkísérlünk olyan anyagokat előállítani, melyek valamilyen módon aktiválva képesek fényt kibocsátani. Ehhez terveink szerint többnyire egyszerű, de néha összetettebb szerves és fémorganikus reakciókat fogunk végrehajtani, így megismerkedhettek egy szerves kémiai labor műveleteivel és mindennapi működésével.



## **Polimerek – Az óriásmolekulák csodálatos világa**

***Témavezetők: Stumphauer Tímea, Pásztói Balázs és Bányai Kristóf***

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

Napjainkban a világ már elképzelhetetlen lenne polimerek (makromolekulák) és a belőlük előállítható műanyagok nélkül. A mindennapjainkban rengeteg helyen találkozunk velük az élelmiszerek csomagolásától kezdve a ruhaanyagon át egészen a számítógépig. Ez a sokszínűség a könnyen és széles határok között változtatható tulajdonságok miatt alakult ki. Ezt nem csak a megszámlálhatatlanul sokféle polimer alapanyagának köszönhetjük, de a tulajdonságokat a molekulatömeg, a láncok szerkezete és a polimerek előállításának módja is befolyásolja.

A tábor során a résztvevők a polimerek csodálatos világába kóstolhatnak bele, mellyel egy dinamikusan fejlődő, sokoldalú és különleges tudományterületet ismerhetnek meg. Kipróbálhatják magukat egy olyan területen, aminek határa a csillagos ég, és tapasztalatot szerezhetnek a jövő anyagainak megalkotásában.

Elsősorban laboratóriumi munka iránt érdeklődő diákokat várunk.

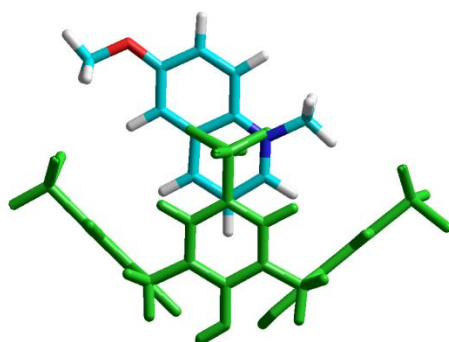
# Szupramolekulák kölcsönhatásának vizsgálata fényel

*Témavezető: Harangozó József Gábor*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

Bizonyos molekulák képesek arra, hogy más, kisebb molekulákkal kölcsönhatásba lépjenek és „szoros” komplexet alkossanak. Ilyen nagy molekulák a makrociklusos vegyületek, amelyekben valamilyen kisebb egység ciklikusan ismétlődik, és így képesek jellegzetes alakot ölteni. Például lehet hordó vagy kehely alakú is egy ilyen makrociklus, amelynek belső ürege is van. Ez az üreg képes befogadni többféle molekulát is. Ezek például lehetnek gyógyszerhatóanyagok vagy egyéb hasznos vegyületek, melyek képesek fényt elnyelni, illetve kibocsátani. Ha beékelődik ez a kis molekula a nagy makrociklusba, akkor ez teljesen megváltoztathatja a foton elnyelési, illetve kibocsátási képességeit. Ezt a változást használjuk ki a két (vagy több) molekula kölcsönhatásának tanulmányozása során. Ehhez olyan, például UV fényt használunk, amelyet ez a molekula elnyel. Ilyenkor a foton elnyelésével energiát vesz fel, melynek egy részét képes másik, nagyobb hullámhosszú fényként kibocsátani (fluoreszkálni). Ezáltal a kötődés erősségét, és egyéb tulajdonságait is meg tudjuk állapítani. Amennyiben ezeket az információkat megismerjük, akkor a körülményektől függően ennek a komplexnek nagyon sok felhasználása lehet. Például kimutathatunk vele más molekulákat, vagy a biológiában fontos folyamatokat vizsgálhatunk. Ezen kívül, ha még termodinamikai méréseket is végzünk, akkor a molekulák egyéb fizikai tulajdonságaira, és a közöttük lévő kölcsönhatásokat jellemző energiák nagyságára is fény derülhet.

A kutatótábor hetében a diákokat bevezetjük a szupramolekuláris kölcsönhatások rejtjelmeibe, láthatják a lézerspektroszkópiai labor működését, aminek során maguk állíthatnak elő makrociklusos oldatokat és kísérleteket végezhetnek különféle fluoreszkáló reakciópartnerekkel. Az alapvető vizsgálatok mellett arra leszünk kíváncsiak, hogy ezek fényelnyelése, illetve fluoreszcencia intenzitása hogyan változik, ha megváltoztatjuk a környezetüket.



Egy kehely alakú makrociklus (zöld) üregébe beékelődött fluoreszkáló vegyület

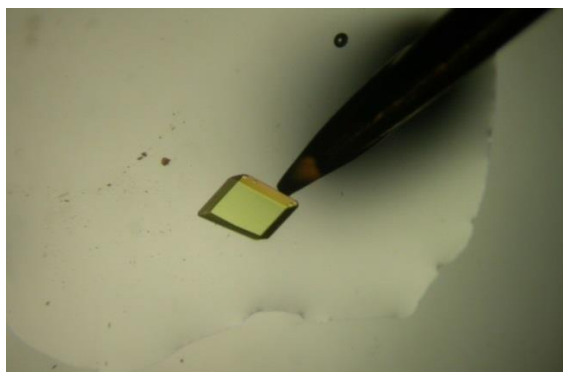
## Tervezzünk és építsünk kristályokat!

*Témavezetők: Holczbauer Tamás, May Nóra, Gál Gyula Tamás és Bombicz Petra*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet*

Számos eljárás létezik a szilárd fázisú atomi szerkezet meghatározására, melyek közül a mai napig legelterjedtebb és leghatékonyabb az egykristály röntgendiffrakció. Ez a módszer a röntgensugarak kristályokon mint optikai rácson való szóródásán alapul. Az egykristály röntgendiffrakciós műszerrel legjobban a 0,3-0,5 mm átmérőjű egykristályok vizsgálhatók, ezért ilyen méretű egykristályokat kell előállítanunk, ami sokszor a munka legnehezebb lépése. Célszerűen megválasztott kísérleti körülményeket alkalmazva más-más formájú és szerkezetű kristályokat nyerhetünk, melyek közül optikai mikroszkóppal választjuk ki a röntgendiffrakciós vizsgálatra megfelelő kristályokat. A mérést és adatfeldolgozást, valamint a szerkezet értelmezését, azaz a kristályszerkezet meghatározását számítógépes programok segítségével végezzük.

Az ábrán egy korábbi kísérletből nyert, mérésre alkalmas kristály látható.



A kutatótábor során megismerkedünk a kristálynövesztés technikáival, fortélyaival, az egykristály diffrakcióval - mint nagyműszeres szerkezetvizsgáló módszerrel -, a mérés és a kiértékelés lépéseivel.

Laboratóriumi munkára és egy kis elméleti kalandozásra is kész, a műszeres analitika iránt érdeklődő, alapvető számítógépes ismeretekkel rendelkező diákok jelentkezését várjuk.

Tematika/ időbeosztás:

- Hétfő: Előállítjuk a vizsgálni kívánt vegyületünket
- Kedd: A vegyületünkből egykristályt növesztünk
- Szerda: A kristályosodott rendszereket megvizsgáljuk
- Csütörtök: A kapott diffrakciós felvételekből visszafejtjük a molekula képét, tanulmányozzuk a tényleges 3 dimenziós szerkezetét
- Péntek: Munka befejezése, előadás