
Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportja és a
Magyar Kémikusok Egyesülete rendezvénye

XLII.
KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK

Programfüzet



Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza
Szeged, 2019. október 28-30.

Szerkesztették:

Böszörményi Éva, Ziegenheim Szilveszter

SZTE TTIK Szervetlen Kémiai és Analitikai Tanszék

Ádám Adél, Kocsis Marianna

SZTE TTIK Szerves Kémia Tanszék

A MAGYAR KÉMİKUSOK EGYESÜLETE
ÁLTAL NÍVÓDÍJJAL KITÜNTETETT
DIPLOMADOLGOZATOK
A 2019. ÉVBEN

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM

BOGNÁR ZSÓFIA: Enzimatisus eljárások alkalmazása mikroRNS-ek multiplex meghatározásához képző felületi plazmon rezonanciával

DECSI BALÁZS: Metalloporfirin alapú biomimetikus oxidáló rendszer fejlesztése és alkalmazása töltött ágyas reaktorban

MAYER SZABOLCS: Új, várhatóan daganatellenes hatású *vinca* alkaloid- és flavonoidszármazékok szintézise

DEBRECENI EGYETEM

BUGLYÓ BALÁZS: Domino gyűrűzárási reakciók vizsgálata kondenzált királis O-heterociklusok előállítására

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

FECSKE DÓRA: Hiperelágazásos poliglicidol és poli(tetrahidrofurán) alapú ABA triblokk-kopolimerek mint önszerveződő gyógyszerhordozó nanorészecskék

KISSNÉ MENKÓ ORSOLYA: A kémiai és fizikai tévképzetek fejlődésének vizsgálata

SIMKÓ IRÉN: On the computation of bound and unbound rovibrational states of weakly-bound molecular systems

ZAGYVA TAMÁS: Examination of novel electrosprayed biogenic hydroxiapatite coatings on Si_3N_4 and $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{MWCNT}$ ceramic composite

MISKOLCI EGYETEM

PREKOP ÁDÁM: Nitrobenzol katalitikus hidrogénezése szén nanocső hordozós katalizátorok alkalmazásával

SIKORA EMŐKE: Klorát ionok katalitikus hidrogénezése nanoszerkezetű katalizátorok alkalmazásával

PANNON EGYETEM

GINA GUNARTO: Chemical and optical characterization of winter rural aerosol

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

EFREMOVA ANASTASHIA: Optimizing noble metal free catalysts for CO₂ activation towards high activity and selectivity

LANTOS EMESE: Iminalapú oszcillátorok tervezése: iminek autokatalitikus hidrolízise

ÁTTEKINTŐ PROGRAM

XLII. KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK

2019. október 28–30.

2019. október 28. hétfő

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, díszterem

08.30 – Regisztráció

09.00 – **9.30** Megnyitó

Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*

A Magyar Kémikusok Egyesülete

Csongrád Megyei Csoportjának elnöke

Dr. Szilágyi István, *egyetemi adjunktus*

A Magyar Kémikusok Egyesülete

Csongrád Megyei Csoportjának titkára

Nívódíjak átadása

Sarkadi Livia

A Magyar Kémikusok Egyesületének

elnöke

Androsits Beáta

A Magyar Kémikusok Egyesületének

ügyvezető igazgató asszonya

09.30 – **10.30** Plenáris előadás

Előadó: Dr. Slobodan Gadžurić, full professor

University of Novi Sad, Faculty of Sciences

10.30 – **10.45** Szünet

10.45 – **12.00** Nívódíjas előadások szekciója I.

Elnök: Dr. Sipos Pál, egyetemi tanár

12.00 – **13.00** Ebédszünet

13.00 – **14.15** Nívódíjas előadások szekciója II.

Elnök: Dr. Endrődi Balázs, egyetemi adjunktus

14.15 – **14.30** Szünet

14.30 – **16.15** English section I.

Chairman: Dr. Slobodan Gadžurić, full professor

2019. október 29. kedd

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, 110. terem

8.00 – **8.45** A kisautóktól a kémián át az autóelektronika fejlesztésig

Előadó: Dr. Pallagi Attila, Robert Bosch Kft

- 8.45 – 9.00 Szünet
- 9.00 – 10.30 **Környezeti- és radiokémiai szekció**
Elnök: Dr. Vidákné Tóth Ildikó, tudományos munkatárs
- 10.30 – 10.45 Szünet
- 10.45 – 12.00 **Analitikai kémia szekció I.**
Elnök: Dr. Galbács Gábor, egyetemi tanár
- 12.00 – 13.00 Ebédszünet
- 13.00 – 14.45 **English section II.**
Chairman: Dr. Janáky Csaba, egyetemi docens
- 14.45 – 15.00 Szünet
- 15.00 – 17.30 **Szerves kémiai szekció II.**
Elnök: Dr. Wölfling János, egyetemi tanár

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, 217. terem

- 9.00 – 10.30 **Szerves kémiai szekció I.**
Elnök: Dr. Kovács Lajos, tudományos főmunkatárs
- 10.30 – 10.45 Szünet
- 10.45 – 12.15 **Anyagtudományi szekció I.**
Elnök: Dr. Janovák László, egyetemi adjunktus

2018. október 30. szerda

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, 110. terem

- 08.00 – 09.30 **Szerves kémiai szekció III.**
Elnök: Dr. Mernyák Erzsébet, egyetemi adjunktus
- 09.30 – 9.45 Szünet
- 9.45 – 11.45 **Fizikai kémia szekció**
Elnök: Dr. Tóth Ágota, egyetemi tanár
- 11.45 – 13.00 Ebédszünet
- 13.00 – 14.45 **Anyagtudományi szekció II.**
Elnök: Dr. Kukovecz Ákos, egyetemi tanár
- 14.45 – 15.00 Szünet

15.00 – 16.30 Analitikai kémia szekció II.

Elnök: Dr. Alapi Tünde, egyetemi adjunktus

RÉSZLETES PROGRAM

2019. október 28. hétfő

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, díszterem

08.00 – Regisztráció

09.00 – 09.30 Megnyitó

Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*

*A Magyar Kémikusok Egyesülete
Csongrád Megyei Csoportjának elnöke*

Dr. Szilágyi István, *egyetemi adjunktus*

*A Magyar Kémikusok Egyesülete
Csongrád Megyei Csoportjának titkára*

Nívódíjak átadása

Sarkadi Livia

A Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke

Androsits Beáta

*A Magyar Kémikusok Egyesületének ügyvezető
igazgató asszonya*

09.30 – 10.30 Plenáris előadás

Ionic liquids – solvents of 21st century

Előadó: Dr. Slobodan Gadžurić

University of Novi Sad, Faculty of Sciences

10.30 – 10.45 Szünet

10.45 – 12.00 Nívódíjas előadások szekciója I.

Elnök: Dr. Sipos Pál, egyetemi tanár

10.45 – 11.00 Enzimatisus eljárások alkalmazása mikroRNS-ek multiplex meghatározásához képalkotó felületi plazmon rezonanciával

Előadó: Bognár Zsófia

11.00 – 11.15 Domino gyűrűzársi reakciók vizsgálata kondenzált királis O-heterociklusok előállítására

Előadó: Buglyó Balázs

- 11:15 – 11:30 Metalloporfirin alapú biomimetikus oxidáló rendszer fejlesztése és alkalmazása töltött ágyas reaktorban
Előadó: Decsi Balázs
- 11:30 – 11:45 Hiperelágazásos poliglicidol és poli(tetrahydrofurán) alapú ABA triblokk-kopolimerek mint önszerveződő gyógyszerhordozó nanorészecskék
Előadó: Fecske Dóra
- 11:45 – 12:00 A kémiai és fizikai tévképzetek fejlődésének vizsgálata
Előadó: Kissné Menkó Orsolya
- 12:00 – 13:00 Ebédszünet
- 13:00 – 14:15 **Nívódíjas előadások szekciója II.**
Elnök: Dr. Endrődi Balázs, egyetemi adjunktus
- 13:00 – 13:15 Iminalapú oszcillátor tervezése: iminek autokatalitikus hidrolízise
Előadó: Lantos Emese
- 13:15 – 13:30 Új, várhatóan biológiailag aktív *vinca* alkaloid- és flavonoidszármazékok előállítása
Előadó: Mayer Szabolcs
- 13:30 – 13:45 Nitrobenzol katalitikus hidrogénezése szén nanocső hordozós katalizátorok alkalmazásával
Előadó: Prekob Ádám
- 13:45 – 14:00 Klorát ionok katalitikus hidrogénezése nanoszerkezetű katalizátorok alkalmazásával
Előadó: Sikora Emőke
- 14:00 – 14:15 Gyengén kötött molekuláris rendszerek kötött és nemkötő rezgési-forgási állapotainak számítása
Előadó: Simkó Irén
- 14:15 – 14:30 Szünet

- 14.30 – 14.45 English section I.**
Chairman: Dr. Slobodan Gadžurić, full professor
- 14.30 – 14.45** Optimizing noble metal free catalysts for CO₂ activation towards high activity and selectivity
Presenter: Anastasiia Efremova
- 14.45 – 15.00** Quantitative analysis of the tryptophan metabolites in multiple sclerosis by UPLC-MS-MS
Presenter: Tömösi Ferenc
- 15.00 – 15.15** Antitumor copper complexes of salicylaldehyde thiosemicarbazones: Solution chemistry and biological activity
Presenter: Tatsiana Petrasheuskaya
- 15.15 – 15.30** Layered double hydroxides for remediation of mining wastewaters
Presenter: Somosi Zoltán
- 15.30 – 15.45** 1,4-dioxane induced structural changes of biomembrane models investigated by molecular dynamics and metadynamics simulations
Presenter: Rózsa Zsófia Borbála
- 15.45 – 16.00** Adsorption of formamide at the surface of amorphous and crystalline ices under interstellar and tropospheric conditions
Presenter: Kiss Bálint
- 16.00 – 16.15** A mechanistic investigation of benzo(a)pyrene formation with acetylene additions
Presenter: Reizer Edina

2019. október 29. kedd

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, 110. terem

- 08.00 – 08.45** **A kisautóktól a kémián át az autóelektronika fejlesztésig**
Előadó: Dr. Pallagi Attila, Robert Bosch Kft
- 09.00 – 10.30** **Környezeti- és radiokémiai szekció**
Elnök: Dr. Vidákné Tóth Ildikó, tudományos munkatárs
- 09.00 – 09.15** Lítium-klorid, mint atkaellenes szer – lehetőség vagy kockázat?
Előadó: Sajtos Zsófi
- 09.15 – 09.30** Szulfametazin átalakítása UV és UV/VUV fotolízissel, ózonos kezeléssel és UV/ózon kombinációjával
Előadó: Farkas Luca
- 09.30 – 09.45** A hipoklórossav reakciója aminosavakkal: képződés- és bomláskinetika
Előadó: Simon Fruzsina
- 09.45 – 10.00** Neonikotinoid tartalmú vizek heterogén fotokatalitikus kezelése
Előadó: Náfrádi Máté
- 10.00 – 10.15** Ciklotronnal előállított ⁴⁴Sc radiojelzési hatékonyságának optimalizálása
Előadó: Forgács Viktória
- 10.15 – 10.30** Specifikus kölcsönhatások alapján dúsuló PET radiofarmakon tervezése
Előadó: Dénes Noémi
- 10.45 – 12.00** **Analitikai kémia szekció I.**
Elnök: Dr. Galbács Gábor, egyetemi tanár
- 10.45 – 11.00** Fenantrolin-mono-N-oxid nikkel(II)- és réz(II)ionokkal alkotott komplexeinek egyensúlyi vizsgálata
Előadó: Najóczki Ferenc
- 11.00 – 11.15** Fluoreszcens jelölésű CRP assay fejlesztése papír hordozón
Előadó: Jurányi Eszter Petra
- 11.15 – 11.30** Kölcsönhatások a trietanol-ammónium-acetát ionos folyadék vizes oldatában
Előadó: Bagány Nikolett
- 11.30 – 11.45** Kvarcüveg hordozón kovalensen rögzített koronaéter alapú direkt optódmembrán fejlesztése és alkalmazása Zn²⁺ spektrofluorimetriás analízisében
Előadó: Kovács Korinna
- 11.45 – 12.00** Makrociklus ionofor alapú plate-rendszerbe ültetett direkt optódmembránok fejlesztése és alkalmazása nehézfémionok nagy áteresztőképességű optikai detektálásában
Előadó: Golcs Ádám

12.00 – 13.00 Ebédszünet

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, 110. terem

13.00 – 14.45 English section II.

Chairman: Dr. Janáky Csaba, egyetemi docens

13.00 – 13.15 Design, synthesis and analysis of novel fluorescent Ca²⁺-sensor compounds
Presenter: Csomos Attila

13.15 – 13.30 Self-assembly of biomacromolecules on halloysite nanotubes
Presenter: Bojana Katana

13.30 – 13.45 Flow-driven crystallization and precipitation kinetics in the lithium-phosphate system
Presenter: Michael Emmanuel

13.45 – 14.00 Synthesis of bi- and trifunctional pinane-based chiral synthons
Presenter: Raji Mounir

14.00 – 14.15 Synthesis and application of neoisopulegol-based 1,2-aminoalcohols with octahydrobenzofuran core
Presenter: Bamou Fatima Zahra

14.15 – 14.30 Photocatalytic hydrogen production on modified CdS-ZnS semiconductors
Presenter: Maali-Amel Mersel

14.30 – 14.45 Polymerization reactions inside carbon nanotubes from coronene and tetrathiotetracene molecules for graphene nanoribbon formation
Presenter: Ana Cadena

14.45 – 15.00 Szünet

15.00 – 17.30 Szerves kémiai szekció II.

Elnök: Dr. Wölfling János, egyetemi tanár

15.00 – 15.15 Szekunder foszfinoxid egységet tartalmazó, 18-korona-6-éterek előállítása
Előadó: Márton Anna

15.15 – 15.30 Izoindolinon-foszfónatok és izoindolinon foszfin oxidok szintézisének tanulmányozása
Előadó: Rávai Bettina

15.30 – 15.45 BODIPY-ösztradiol konjugátumok szintézise
Előadó: Szabó Vivien

15.45 – 16.00 Diterpénvázás királis aminodiolok sztereoselektív előállítása és alkalmazása királis katalizátorként
Előadó: Ozsvár Dániel

- 16.00 – 16.15** Szilárd hordozóhoz rögzített heteropolisavak:
nagyhatékonyságú katalizátorok alkil-aromás vegyületek előállítására
Előadó: Császár Zsófia
- 16.15 – 16.30** Lombikból áramlásos reaktorba: a technológia váltásának
lehetőségei a vortioxetin szintézisének példáján keresztül
Előadó: Nagy-Győr László
- 16.30 – 16.45** Foszfabenzolok aromásságának és stabilitásának vizsgálata
Előadó: Mikeházi Antal János
- 16.45 – 17.00** Elektrofil funkciós csoportok és tiol-modellvegyületek reakciója
Előadó: Varga Petra Regina
- 17.00 – 17.15** Új biomimetikus katalizátor család kifejlesztése gyógyszermetabolitok szintézisére
Előadó: Krammer Réka
- 17.15 – 17.30** Elemi kén alkalmazása multikomponensű reakciókban
Előadó: Szabó Renáta

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, 217. terem

- 09.00 – 10.30 Szerves kémiai szekció I.**
Elnök: Dr. Kovács Lajos, tudományos főmunkatárs
- 09.00 – 09.15** Izotiocianát alapú cisztein-szelektív fluoreszcens antitest
Előadó: Petri László
- 09.15 – 09.30** Egy dinamikus rezolválási eljárás alkalmazása
amino-foszfóniumsó diasztereomerek előállítására
Előadó: Fersch Dávid
- 09.30 – 09.45** P-sztereogén centrumot tartalmazó aciklusos foszfin-oxidok
alkalmazása enantioszelektív katalitikus Wittig-reakcióban
Előadó: Péczka Nikolett
- 09.45 – 10.00** Állófázishoz való kovalens rögzítésre alkalmas koronaéter
szelektormolekula heteroaromás kulcsintermediereinek
szintézise
Előadó: Benda Bianka
- 10.00 – 10.15** Nukleozidok tioladdíciós módosítása és a termékek
biológiai hatásvizsgálata
Előadó: Bege Miklós
- 10.15 – 10.30** Naftoxazinon-származékok egyedényes és kétlépéses szintézise
T3P[®] felhasználásával
Előadó: Varga Valentina
- 10.45 - 12.15 Anyagtudományi szekció I.**
Elnök: Dr. Janovák László, egyetemi adjunktus
- 10.45 – 11.00** Kémiaiilag módosított kitozánbevonatok korróziós
védőhatásának és nedvesedési tulajdonságainak
tanulmányozása
Előadó: Márton Péter
- 11.00 – 11.15** Eltérő szerkezetű felületaktív anyagok alkotta micellák
képződésének vizsgálata kalorimetriás módszerrel
Előadó: Seres László
- 11.15 – 11.30** Szérum albumin alapú kompozitok előállítási lehetőségeinek
vizsgálata
Előadó: Kovács Nikolett Alexandra
- 11.30 – 11.45** Polimer alapú kolloidális gyógyszerhordozók
„kvázi” kétdimenziós szenzortechnikák általi jellemzése
Előadó: Varga Norbert
- 11.45 – 12.00** Rifampicin poliaszpartamid nanoszálás formulájának előállítása
szemészeti alkalmazásra
Előadó: Vincze Anna
- 12.00 – 12.15** Meloxikám tartalmú polimer micellák formulációja és vizsgálata
Előadó: Sipos Bence

2018. október 30. szerda

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, 110. terem

- 08.00 – 09.15 Szerves kémia III.**
Elnök: Dr. Mernyák Erzsébet, egyetemi adjunktus
- 08.00 – 08.15** Lipofil oldallánccal szubsztituált cinkona alapú organokatalizátorok szintézise, alkalmazása és visszanyerése
Előadó: Molnár Balázs
- 08.15 – 08.30** Hidrobenzoin-alapú újrahaználható királis koronaéterek szintézise és alkalmazása
Előadó: Oláh Attila László
- 08.30 – 08.45** Antivirális neuraminsav-származékok szintézise
Előadó: Lőrincz Eszter Boglárka
- 08.45 – 09.00** Fotoiniciált tiol-én addíciós reakciók telítetlen mono- és diszacharidokon
Előadó: Kelemen Viktor
- 09.00 – 09.15** Élősejtek szol-gél immobilizálása biotranszformációs célokra
Előadó: Tóth Gergő Dániel
- 09.15 – 09.30** Az akridinegység 9-es pozíciójában módosított származékokés makrociklusos analogonjaik spektroszkópiai összehasonlítása
Előadó: Ádám Bálint Árpád
- 9.45 – 11.45 Fizikai kémia**
Elnök: Dr. Tóth Ágota, egyetemi tanár
- 9.45 – 10.00** Áramlásvezérelt csapadékképződés vékony folyadékrétegben
Előadó: Balog Edina
- 10.00 – 10.15** A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció potenciálisenergia-felületének fejlesztése különböző kvantumkémiai szinteken
Előadó: Tasi Domonkos Attila
- 10.15 – 10.30** Nanoméretű Gd(III)-komplexek előállítása és vizsgálata
Előadó: Mikósi Tamás
- 10.30 – 10.45** Egyoldalú NMR: az NMR mouse rejtelméi
Előadó: Nyul Dávid
- 10.45 – 11.00** Polimorfok egyensúlyi oldhatóságának vizsgálata hagyományos módszerrel és valós idejű követéssel
Előadó: Csicsák Dóra
- 11.00 – 11.15** Csapadékképződés modellezése mikrofluidikás reaktorban
Előadó: Papp Paszkál
- 11.15 – 11.30** Félvezető elektródok optoelektronikai tulajdonságainak tanulmányozása
Előadó: Balog Ádám
- 11.30 – 11.45** Fotelektrokémiai ammónia szintézis nitrát ionból réz-jodid/ólom-jodid kompozit fotelektrodokon
Előadó: Kecsenovity Egon

- 12.00 – 13.00 Ebédszünet
- 13.00 – 14.45 **Anyagtudomány II.**
Elnök: Dr. Kukovecz Ákos, egyetemi tanár
- 13.00 – 13.15 Fenotiazin karbonsavak előállítás és interkalálása réteges kettős hidroxidokba I.
Előadó: Nagy Sándor Balázs
- 13.15 – 13.30 Fenotiazin karbonsavak előállítás és interkalálása réteges kettős hidroxidokba II.
Előadó: Szabó Yvette
- 13.30 – 13.45 Alumíniumban gazdag réteges kettős és hármas hidroxidok előállítás, szerkezetük jellemzése
Előadó: Papp Ádám
- 13.45 – 14.00 Kétdimenziós félvezető nanolapok fotoelektrokémiai vizsgálata
Előadó: Szabó Gábor
- 14.00 – 14.15 Szén nanogömb alapú inverz opál fotonikus kristályok előállítása
Előadó: Karajz Dániel
- 14.15 – 14.30 Amorf szén hordozón immobilizált arany és palládium nanorészecskék szintézise és felhasználása a szén-dioxid elektrokatalitikus redukciójában
Előadó: Karádi Krisztina
- 14.30 – 14.45 Ellagsav alapú réteges kettős hidroxid hibridek antioxidáns aktivitása
Előadó: Szerlauth Adél
- 14.45 – 15.00 Szünet
- 15.00 – 16.30 **Analitikai kémia II.**
Elnök: Dr. Alapi Tünde, egyetemi adjunktus
- 15.00 – 15.15 Heterogén fotokatalizátorok O_2^- generáló képességének vizsgálata új módszerrel
Előadó: Fónagy Orsolya
- 15.15 – 15.30 Tabletták minőségellenőrzésére szolgáló gépi látást alkalmazó rendszer fejlesztése
Előadó: Mészáros Lilla
- 15.30 – 15.45 Dizájner drogok és metabolitjaik az igazságügyi gyakorlatban
Előadó: Körmöczi Tímea
- 15.45 – 16.00 Kétfázisú kioldásvizsgálati módszer fejlesztése egy rossz vízoldhatóságú hatóanyag különböző kristálmódosulatainak egyidejű kioldás és felszívódás vizsgálatához
Előadó: Kádár Szabina
- 16.00 – 16.15 Méretkizárásos membrán, mint a lipidmembránok alternatívája
Előadó: Tözsér Petra
- 16.15 – 16.30 Kelátképzők inhibíciós hatása gipsz kristályosodására
Előadó: Ziegenheim Szilveszter

PLENÁRIS ELŐADÁS

IONIC LIQUIDS – SOLVENTS OF 21st CENTURY

Slobodan Gadžurić

*Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 3,
21000 Novi Sad, Serbia*

Ionic liquids (ILs) are organic salts with melting point below 100 °C and remarkable chemical properties, which find applications in many areas of modern science. Due to their highly tunable nature and exceptional features, ionic liquids have become essential players in the fields of synthesis and catalysis, extraction, electrochemistry, analytics, biotechnology, pharmacy etc. Apart from physical and chemical features of ionic liquids, their high biological activity has been attracting significant attention from biochemists, ecologists, and medical scientists. Besides their unique properties and usage as solvents, the tunable nature of ILs has facilitated the development of novel valuable topics and revolution in material science. The number of research involving ILs is impressive and is growing significantly more rapidly than that for several other actively developing research areas. It is interesting to note that the focus of many IL studies now evolves in the direction of life sciences and medicine. Studies on the biological activity, toxicity and application of ILs in pharmaceuticals and medicine are newly emerging. The structure and organization of ILs in solution is the crucial point for understanding their interactions with living organisms and usage of ILs as components of drugs and applications of ILs in drug synthesis.



NÍVÓDÍJAS ELŐADÁSOK SZEKCIÓJA I.

ENZIMATIKUS ELJÁRÁSOK ALKALMAZÁSA MIKRO-RNS-EK MULTIPLEX MEGHATÁROZÁSÁHOZ KÉPALKOTÓ FELÜLETI PLAZMON REZONANCIÁVAL

Bognár Zsófia, Simon László Ferenc, Dr. Gyurcsányi E. Róbert

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, BME „Lendület”
Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport, 1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.*

A mikro-RNS-ek egyszálú, jellemzően 19-25 nukleotid hosszú, fehérjét nem kódoló RNS-ek, melyek többsége szövetspecifikus. Rendellenes expressziójuk különböző betegségekkel hozható összefüggésbe, például daganatos, kardiovaszkuláris, autoimmun megbetegedésekkel, diabétesssel, idegrendszeri-, vese-, és májdiszfunkciókkal. Ezáltal ígéretes diagnosztikai és prognosztikus biomarkerek lehetnek. Azonban a mikro-RNS-ek rendkívül kis koncentrációban fordulnak elő a keringésben, ezért megbízható méréstechnikák kifejlesztésére van szükség. Kutatócsoportunkban célul tűztük ki, képalkotó felületi plazmon rezonanciás (SPRi) platformon alapuló mikro-RNS diagnosztikai panel fejlesztését peptid-nukleinsav (PNS) felismerő szálak alkalmazásával [1]. Az SPRi nagy áteresztőképességű technika és kiválóan alkalmazható valós idejű kötődési kinetikák meghatározására is, azonban érzékenysége nem éri el a diagnosztikai célú mikro-RNS meghatározáshoz szükséges koncentrációtartományt. Méréseinkhez modellként a hsa-miR-208a mikro-RNS-t választottuk, melynek koncentrációja szívizomsérülések esetén növekszik meg a vérben, ezáltal korai fázisban lehetővé teszi a szívinfarktus diagnosztizálását. Munkám során jelerősítésre alkalmas izotermikus amplifikáción, valamint poliadenilációs reakción alapuló módszereket dolgoztam ki a kimutatási határ csökkentésére. Az oldatfázisban lejátszódó izotermikus amplifikáció (NASBA-Nucleic Acid Sequence Based Amplification) során három enzim együttes működésének eredményeként a kiindulási mikro-RNS szekvencia exponenciálisan sokszorosítható [2]. A poliadenilációs reakció egy univerzális, felületi jelerősítési módszer, melynek során a mikro-RNS 3'-terminálisán poli(A)-lánc jön létre [3]. A poliadenin szál szintézisét a timin lánccal módosított arany nanorészecskék hibridizációján alapuló érzékenyítés követi. A módszerek szelektivitását az SPRi chip aranyfelületére immobilizált hsa-miR-208a szekvenciájával komplementer PNS szálak biztosítják. Így a kidolgozott jelerősítési módszerek szelektív, valós időben követhető mikro-RNS detektálást, valamint hat nagyságrendű erősítést tesznek lehetővé.

[1] L. Simon; G. Lautner; and R. E. Gyurcsányi, *Anal. Methods*, **2015**, 7 (15), 6077–6082.

[2] J. Compton, *Nature*, **1991**, 350 (6313), 91–92.

[3] D. F. Colgan and J. L. Manley, *Genes Dev.*, **1997**, 11 (21), 2755–2766.

DOMINO GYŰRŰZÁRÁSI REAKCIÓK VIZSGÁLATA KONDENZÁLT KIRÁLIS O-HETEROCIKLUSOK ELŐÁLLÍTÁSÁRA

Buglyó Balázs^a, Dr. Kurtán Tibor^b

^a Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszék, 4027 Debrecen Egyetem tér 1

^b Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszék, 4027 Debrecen Egyetem tér 1

A diplomamunkám célkitűzése olyan kondenzált királis O-heterociklusok előállítása volt domino gyűrűzárási reakciókkal, melyek közeli analógiát mutattak a kutatócsoportban korábban előállított sejtosztódás gátló hatású rokon vegyületekkel.

3-formilkromonból kiindulva három lépésben egy 3-ariloximetilkromon származékot állítottam elő, amely a benzol gyűrűn *orto* pozícióban egy formil csoportot tartalmazott. Ezt a vegyületet használtam kiindulási anyagként domino Knoevenagel-intramolekuláris hetero Diels-Alder reakciókban, melyeket gyűrűs β -dikarbonil reagensekkel hajtottam végre. A szokásos gyűrűzárási körülmények komplex reakcióelegyet eredményeztek, míg enyhébb körülményeket alkalmazva a Knoevenagel kondenzált termék szintjén megállt a reakció amit sikerült izolálni és karakterizálni.

Fahéjalkoholból kiindulva két lépésben állítottam elő a domino gyűrűzárási reakció O-formilaryléter kiindulási anyagát. Négy gyűrűs β -dikarbonil reagenssel sikeres domino Knoevenagel-intramolekuláris hetero Diels-Alder reakciót hajtottam végre a kondenzált O-heterociklusos vegyületek előállítására. Három vegyület esetében diasztereomer egységes terméket sikerült izolálni, melyek relatív konfigurációját az $^1\text{H NMR } ^3J_{\text{HH}}$ csatolási állandók alapján sikerült meghatározni. 1,3-ciklohexán-dion esetében a termék diasztereomerek elegyének bizonyult, míg malononitrillel a Knoevenagel kondenzált terméket sikerült alacsony termeléssel izolálni.

A domino gyűrűzárási reakcióval előállított vegyületek nyíltláncú kromán egységet nem tartalmazó analógiái a kutatócsoportban korábban előállított, jó sejtosztódás gátló hatású vegyületeknek.

Köszönetemet szeretném kifejezni Prof. Dr. Kurtán Tibor tanszékvezető egyetemi tanárnak, témavezetőmnek, hogy a diplomamunkámat a Debreceni Egyetem Szerves Kémiai tanszékén készíthettem el, továbbá, hogy a kutatómunkámat irányította és útmutatásaival segítette.

Köszönöm Király Sándor Balázs tudományos segédmunkatársnak az NMR spektrumok kiértékelése, illetve a szintetikus munka során nyújtott segítségét.

Szeretném megköszönni Tóth László egyetemi tanársegédnek az IR és Dr. Kónya-Ábrahám Anitának a GC/MS spektrumok felvételét.

METALLOPORFIRIN ALAPÚ BIOMIMETIKUS OXIDÁLÓ RENDSZER FEJLESZTÉSE ÉS ALKALMAZÁSA TÖLTÖTT ÁGYAS REAKTORBAN

**Decsi Balázs^a, Földi Tamás^a, Kupai József^a, Dr. Balogh-Weiser Diána^{a,c}, Dr. Balogh György
Tibor^b**

^aBME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.

^bBME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

^cBME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

A gyógyszerjelölt vegyületek preklinikai vizsgálatának egyik fontos lépése a metabolit kutatás, mely során az anyavegyület átalakulásának kvantitatív jellemzése, illetve képződő metabolitok izolálása és azonosítása az elsődleges cél. Ezt hagyományosan in vivo élő szervezeteken, valamint a belőlük készült in vitro sejtes módszerekkel végzik. Ez a megközelítés azonban analitikai szempontból számos kihívást jelent, illetve az állatkísérletek miatt etikai kérdéseket is felvet. Kiváltásukra egy alternatív megoldást jelenthet szintetikus metalloporfirin alapú biomimetikus oxidáló rendszerek alkalmazása.

Munkám két részre bontható. Egyrészt szintetikus metalloporfirin alapú, homogén biomimetikus oxidáló rendszert fejlesztettem ki, amely közvetlenül a hatóanyagból homogén közegben egy lépésben képes metabolitokat előállítani. Hátránya a porfirin gyors degradációja, és így a katalizátor rövid élettartama, ami javítható, szilárd hordozóhoz való rögzítéssel. Munkám második részében ezt kihasználva mezo-tetra(4-szulfoniloxifenil) vasporfirint rögzítettem elektrosztatikus kölcsönhatással, felületén aminopropil csoportokkal módosított szilikagél felületére. Az így kialakított rögzített katalizátort áramlásos körülmények között alkalmazva robusztus módon állítottam elő metabolitokat.

[1]

[1] T. Földi, G. Ignácz, B. Decsi, Z. Béni, Gy. I. Túrós, J. Kupai, D. Balogh-Weiser, I. Greiner, P. Huszthy, Gy. T. Balogh; *Chemistry - A European Journal*, **2018**, (37), 9385–9392.

HIPERELÁGAZÁSOS POLIGLICIDOL ÉS POLI(TETRAHIDROFURÁN) ALAPÚ ABA TRIBLOKK-KOPOLIMEREK MINT ÖNSZERVEZŐDŐ GYÓGYSZERHORDOZÓ NANORÉSZECSKÉK

Fecske Dóra^a

*“Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Polimer Kémiai Kutatócsoport,
Magyar tudósok körútja 2, 1117 Budapest
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Hevesy György Kémia Doktori Iskola, Pázmány Péter stny. 1/A, 1117
Budapest*

Munkám során HbPG-PTHF-HbPG ABA triblokk-kopolimerek előállítását, önszerveződő viselkedését és hatóanyag-hordozó rendszerként történő alkalmazhatóságát vizsgáltam. Az irodalomban eddig még nem közölt módon sikeresen állítottam elő három eltérő molekulatömegű és összetételű HbPG-PTHF-HbPG ABA blokk-kopolimert. Amint azt a kapott anyagok ¹H-NMR spektroszkópiás és GPC analízise igazolta, a glicidol polimerizációja a PTHF makroiniciátoron játszódott le. Az így kapott blokk-kopolimerekről megállapítottam, hogy felületaktív tulajdonsággal rendelkeznek, és vizes oldatban micellákat képeznek *cmc* értékük felett. DLS mérések eredményei egyértelműen arra utalnak, hogy önszerveződés révén ~13-15 nm átmérőjű micellák keletkeznek a *cmc*-nél nagyobb polimer koncentrációk esetén.

A polimerek hatóanyag-hordozó képességét egy természetes, vízben rosszul oldódó modell hatóanyag, a kurkumin szolubilizációjával vizsgáltam. A hatóanyag sikeres kapszulázását fluoreszcens mérésekkel igazoltam, illetve ¹H-NMR NOESY mérések egyértelműen azt mutatták, hogy a hatóanyag a micella belső hidrofób PTHF fázisában helyezkedik el. Meghatároztam, hogy az előállított blokk-kopolimerek a vízhez képest akár 700-szor több hatóanyagot képesek oldatba vinni. A kurkuminnal töltött micellák oldatban még egy hét után is stabilak maradtak, méretük és hatóanyag-tartalmuk csak elhanyagolható mértékben változott. A kurkuminnal töltött micellák időben elnyújtottan adják le a kurkumint, és a HbPG/PTHF arány változtatásával, valamint a hatóanyag mennyiségével befolyásolható a hatóanyag leadásának sebessége. Ezen felül sejtes vizsgálatokat is végeztünk, melyek azt mutatták, hogy a kurkuminnal töltött micellák hatékonyabban képesek a sejtekbe jutni, mint a szabad kurkumin. A kapott eredmények alapján tehát kijelenthető, hogy ezek a polimerek hatékonyan alkalmazhatóak vízben rosszul oldódó hatóanyagok kapszulázására, valamint nagy stabilitású hatóanyag-hordozó rendszerekként.

Ezúton szeretném megköszönni témavezetőimnek, Dr. Kasza Györgynek és Dr. Iván Bélának a munkám során nyújtott segítségüket, hasznos tanácsaikat és a kitartó támogatásukat.

A KÉMIAI ÉS FIZIKAI TÉVKÉPZETEK FEJLŐDÉSÉNEK VIZSGÁLATA

Kissné Menkó Orsolya

Jankay Tibor Két Tanítási Nyelvű Általános Iskola

Szakdolgozatomban azt vizsgáltam, hogy a tanulók hogyan gondolkodnak a már tanult alapvető fizikai és kémiai fogalmakról. Az elemi összefüggésekről alkotott téves elképzelések felderítése és elemzése volt a célom. Egy általam összeállított, a diákok által kitöltött kérdőívek tanulmányozása során dolgoztam föl az egyes feladatok kapcsán megjelenő tévképzeteket.

Kijelenthető: a tanulók kémiai tudása minden korosztály esetén igen nagy heterogenitást mutat, illetve ugyanez jellemző a tévképzetek megjelenésére is. A konklúziót tartalmazó fejezetben felsoroltam a leggyakrabban előfordulóknak közül a véleményem szerint legjelentősebb, tipikus hibákat. Ezekre érdemes odafigyelni. Ha a dolgozatomban megfogalmazott egyszerű tanácsokat szem előtt tartjuk, akkor nagyobb eséllyel előzhetjük meg a tévképzetek kialakulását, és a már meglévőket is sikeresebben kijavíthatjuk. Fontos, hogy a korrigálásban a diákokat partnerként kezeljük, és őket is meggyőzve, közösen tegyünk ilyen irányú erőfeszítéseket, mert különben valószínűleg nem érünk el tartós változást.

Találtam olyan eredményeket, amelyekre a vonatkozó szakirodalom alapján számítani lehetett. Így az életkor előrehaladtával a tanulók egyre bátrabban formálnak véleményt az egyes kémiai feladatok kapcsán, és válaszaik is egyre nagyobb százalékban helyesek.

Azonban olyan következtetéseket is le tudtam vonni, amelyek nem voltak ennyire magától értetődők. Például: a kognitív gát nagyon erősen befolyásolja az alapvető számolási példák megoldását...

Összességében dolgozatomban egy olyan válogatást sikerült létrehoznom, amely felhívja a figyelmet néhány, a kémia tanítása és tanulása során előforduló nagyon fontos hibalehetőségre. Ha ezeket a problémákat sikerül időben és megfelelő alaposítással orvosolni, akkor lehet, hogy a tanulók szívéhez is közelebb kerülhet a kémia tantárgy. Az se nagy baj, ha mégse sikerülne minden diákunkkal megszerettetnünk kémiát, hiszen a körültekintő és logikus gondolkodás fejlesztésében azért biztosan segíthetünk nekik is. Erre a képességre ugyanis az élet más területein is szükségük van.

„Non scholae, sed vitae discimus.” (Seneca)

NÍVÓDÍJAS ELŐADÁSOK SZEKCIÓJA II.

IMINALAPÚ OSZCILLÁTOR TERVEZÉSE: IMINEK AUTOKATALITIKUS HIDROLÍZISE

Lantos Emese^a, Horváth Dezső^b, Tóth Ágota^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

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

Az evolúció által létrehozott folyamatokat alapul vevő kutatások nagy sikerrel alkalmazhatók olyan gyakorlati problémák megoldására, mint az önszerveződés és önrendeződés jelensége, az érzékelés, a töltésátvitel vagy a méltán kiemelt katalízis [1]. A természet inspirálta, biológiai rendszerek fizikai és kémiai tulajdonságait tükröző, azokkal szerkezetbeli hasonlóságot mutató mesterséges struktúrák – molekuláris gépek, reakcióháló, oszcillátorok – kialakítása a Systems Chemistry, más néven rendszerkémia tárgykörébe sorolható [2]. Ennek nyomán, munkám végső céljaként olyan szerves oszcillátor létrehozását tűztük ki, amely a jövőben pH-szenzitív, biokompatibilis géllel kombinálva alkalmazható lehet mesterséges izomzat vagy szabályozott hatóanyagleadó-rendszer kialakítására.

Oszcillátorok tervezésekor az első lépést képezheti egy olyan reakció keresése, mely autokatalitikus sajátságot mutat. Ezen reakcióként az iminhidrolízist választottuk, hiszen kutatások alapján bebizonyosodott, hogy a reakció sebessége együtthatója függ a pH-tól [3], valamint a kutatócsoportban előzetesen végzett modellezési próbálkozások is felvetették az autokatalízis lehetőségét. A négy, különböző szerkező imin hidrolízisét a pH nyomon követésével vizsgáltuk, amely során bebizonyosodott, hogy autokatalizátorként a hidroxidion szolgál. A kiindulási vegyületek közül kettő mutatott jelentősebb hatást, így a későbbiekben azokra helyeztük a hangsúlyt. A hidroxidionkoncentráció vs. idő görbék mennyiségi elemzésével meghatároztuk mind az autokatalízis erősségét, mind pedig annak típusát. A mért kísérleti adatokra alapozva egy kezdetben négy, majd öt lépésből álló modell megalkotására is sor került, mellyel sikeresen alátámasztottuk a kísérleti megfigyeléseket.

[1] R. R. Naik, S. Singamaneni; *Chemical Reviews*, **2017** (117) 12581-12583.

[2] G. Ashkenasy, T. M. Hermans, S. Otto, A. F. Taylor; *Chemical Society Reviews*, **2017** (46) 2543-2554.

[3] E. H. Cordes, W. P. Jencks; *Journal of the American Chemical Society*, **1963** (85) 2843–2848.

Köszönetnyilvánítás:  Az Emberi Erőforrások Minisztériuma UNKP-18-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság programjának támogatásával készült.

ÚJ, VÁRHATÓAN BIOLÓGIAILAG AKTÍV VINCA ALKALOID- ÉS FLAVONOIDSZÁRMAZÉKOK ELŐÁLLÍTÁSA

Mayer Szabolcs^a, Keglevich Péter^a, Hazai László^a

^aBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest Gellért tér 4.

Kutatómunkám során természetes szerves anyagok szerkezetének módosításával foglalkozom. Az általam végrehajtott reakciók egy csoportját a *meta*-klór-perbenzoesavval végzett oxidációs reakciók képviselték. Ezek során előállítottam a vindolin *orto*-benzokinon-származékát, illetve a katarantin *N*-oxid-származékait [1]. Az oxidációs reakciókat követően Diels-Alder-reakciókat kíséreltem meg végrehajtani az új *orto*-benzokinon-származék felhasználásával, a reakció nem a várt terméket szolgáltatva. A nem várt termékhez vezető reakció feltételezett mechanizmusát felírtam [2]. Munkámat ezután egy hibridmolekula előállításának kísérletével folytattam. A többlépéses szintézis során vindolinból kiindulva 10-klóracetamido-vindolint állítottam elő, amit ezután krizinnel reagáltattam. A reakció terméke nem a várt ariloxi-acetamid-származék volt, hanem egy difenil-amin típusú vegyület. A termékhez vezető reakció mechanizmusának feltárásához modellkísérleteket végeztünk, illetve a modellkísérletekkel párhuzamosan az eredeti kapcsolási reakciót módosított körülmények között hajtottam végre. A kísérleteket követően egy három lépésből álló konszekutív folyamatként írtam fel a nem várt termékhez vezető reakciót. Az első lépés a krizin alkilezése, ezt követi a Smiles-átrendeződés, majd egy hidrolízis, amelyek az alkilezést követően viszonylag gyorsan lejátszódnak. Az új hibridet és a modellkísérletek termékeit az amerikai NIH intézetében *in vitro* vizsgálatoknak vetették alá.

[1] A. Keglevich,; Sz. Mayer, R. Pápai, Á. Szigetvári, Zs. Sánta, M. Dékány, Cs. Szántay, Jr., P. Keglevich, L. Hazai,; *Molecules*, **2018**, (23), 2574-2594.

[2] Sz. Mayer, P. Keglevich, P. Ábrányi-Balogh, Á. Szigetvári, M. Dékány, Cs. Szántay Jr., L. Hazai,; *Period. Polytech. Chem. Eng.*, **2017**, (61), 258-263.

Köszönöm a segítségét témavezetőmnek Dr. Keglevich Péternek, konzulensemnek Dr. Hazai Lászlónak és kutatócsoportunkban dolgozó munkatársaimnak. Továbbá köszönöm Dr. Ábrányi-Balogh Péternek az *in silico* számításokat, Dr. Dékány Miklósnak az MS méréseket és Szigetvári Áronnak, valamint Dr. ifj. Szántay Csabának az NMR spektrumok felvételét és értékelését.

NITROBENZOL KATALITIKUS HIDROGÉNEZÉSE SZÉN NANOCső HORDOZÓS KATALIZÁTOROK ALKALMAZÁSÁVAL

Prekob Ádám^a, Vanyorek László^a

^a*Kémiai Intézet, Miskolci Egyetem, 3515, Miskolc-Egyetemváros*

Kutatómunkám során anilinszintézisre alkalmas katalizátorok előállításával foglalkoztam. A kutatást az indukálta, hogy a borsodi régió legnagyobb vegyipari vállalata, a Wanhua Borsodchem jelenleg anilinüzemet épít egy nagy beruházás keretében, ezért olyan katalizátorok előállítását tűztem ki célul, amelyek alkalmasak lehetnek akár ipari szinten is anilin előállítására. A katalizátorokkal szemben elvárás a magas nitrobenzol konverzió, a szelektivitás az anilinre nézve, a nagy stabilitás, illetve a könnyű kezelhetőség és visszanyerhetőség. A diplomamunkám során Pd, Rh, illetve Pt tartalmú szén nanocső hordozós katalizátorokat állítottam elő és jellemeztem (TEM, SEM, XRD, TG), amelyek közül a legjobbat előtesztek segítségével választottam ki. Először butén gázfázisú hidrogénezésében teszteltem le a katalizátorokat, mivel ez egy rendkívül gyors és egyszerűen nyomon követhető reakció. A legjobbnak bizonyult Pd tartalmú katalizátort oktadecén folyadékfázisú hidrogénezési reakciójában teszteltem, ahol közel 100% konverziót ért el. A szén nanocsővek jól szerepeltek hordozóként, azonban eltávolításuk körülményesnek bizonyult. A probléma megoldására egy „hordozó a hordozón” kompozitot hoztam létre, amely makroszkopikus méreteinek köszönhetően egyszerűen eltávolíthatóvá vált. Az új hordozós katalizátort ismét leteszteltem az említett reakciókban, amelyekben nagyszerűen teljesített. Az utolsó teszten, a nitrobenzol hidrogénezése során 100%-os konverziót és 80%-os anilinhozamot sikerült elérni.

Elsősorban köszönettel tartozom Dr. Vanyorek Lászlónak, a Miskolci Egyetem Kémiai Intézet adjunktusának a konzulensemként nyújtott segítségért, továbbá Hutkainé Göndör Zsuzsannának, a Miskolci Egyetem Kémiai Intézetének mérnöktanárnőjének, aki a kutatómunkámat felügyelte és segítette. Köszönet illeti Pekker Pétert, az MTA ME Anyagtudományi Kutatócsoport tudományos munkatársát, aki a TEM és SEM felvételeket készítette el számomra. Köszönettel tartozom Dr. Kristály Ferencnek (Ásványtani és Földtani Intézet) az XRD felvételekért. Szeretném megköszönni Dr. Muránszky Gábornak, a Miskolci Egyetem docensének a segítséget a kromatográfiás mérésekben. Végül köszönet illeti Dr. Viskolcz Béla Intézetigazgató Urat a kutatási lehetőségek megteremtéséért.

KLORÁT IONOK KATALITIKUS HIDROGÉNEZÉSE NANOSZERKEZETŰ KATALIZÁTOROK ALKALMAZÁSÁVAL

Sikora Emőke^a, Vanyorek László^a

^a*Miskolci Egyetem, Műszaki Anyagtudományi Kar, Kémiai Intézet, 3515 Miskolc-Egyetemváros*

Munkám során négy különböző reaktor töltetként alkalmazott hordozó felhasználásával állítottam elő katalizátorokat. A különböző geometriájú hordozók (pellet, gyűrű) felületén CCVD (Catalytic Chemical Vapour Deposition) módszer segítségével bambusz szerkezetű szén nanocsöveket mint elsődleges katalizátor hordozókat növesztettem, majd Pd nanorészecskéket alakítottam ki felületükön.

A fentebb leírt komplex katalizátor fejlesztését az indokolta, hogy a szén nanocsövek nanoméretük és felületük poláris jellege miatt képesek stabil diszpergált rendszert alkotni a reaktánsok oldatával, ami egy folyamatos működésű, áramlásos rendszerű hidrogénező reaktor esetében kerülendő. Az említett problémára ideális megoldást kínál az általam alkalmazott eljárás, a réteges szerkezetű katalizátor. Jellemeztem az előállított katalizátortölteteket pásztázó elektronmikroszkóp, energiadiszperzív elemanalízis, röntgendiffrakció és termogravimetria segítségével, majd katalitikus aktivitásukat teszteltem but-1-én hidrogénezési reakciójában, ahol egy kivétellel mindegyik katalizátor több, mint 90%-os konverziót ért el.

A katalitikus aktivitást mutató katalizátorokat használtam fel klorát ionok hidrogénezésére. Az általunk létrehozott katalitikus mérőrendszer lehetővé tette a kloráttartalom folyamatos követését áramlásos rendszerben. A legjobb eredményt 2% Pd/BCNT-KGEA katalizátor eredményezte, mely alkalmazása során egy óra alatt a klorátkoncentráció 19 mg/l-re csökkent. Az eredményekből megállapítható, hogy a kutatómunka során kifejlesztett katalizátorok alkalmasak lehetnek vegyipari kloráttartalmú szennyvizek kezelésére, kloráttartalmának csökkentésére.

Az Emberi Erőforrások Minisztériuma Új Nemzeti Kiválósági Programjának támogatásával készült

GYENGÉN KÖTÖTT MOLEKULÁRIS RENDSZEREK KÖTÖTT ÉS NEMKÖTŐ REZGÉSI-FORGÁSI ÁLLAPOTAINAK SZÁMÍTÁSA

Simkó Irén^a, Dr. Szidarovszky Tamás^{b,c}, Prof. Dr. Császár Attila^{b,c}

^a*ELTE Hevesy György Kémia Doktori Iskola*

^b*ELTE TTK Kémia Intézet, Molekulaszerkezet és Dinamika Laboratórium*

^c*MTA-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport*

Rezonancia állapotnak nevezzük egy molekuláris rendszer azon állapotát, melynek energiája elegendő ahhoz, hogy a molekula disszociáljon, azonban ez nem történik meg rögtön, hanem az állapot véges élettartammal jellemezhető [1]. A molekulák rezgési-forgási rezonanciáinak fontos szerepe van a reaktív szórásos kísérletekben, a spektroszkópiában és a reakciódinamikában is. De ezen állapotokra nem lehet a magmozgásra felírt időfüggetlen Schrödinger-egyenletet a szokásos, kötött állapotoknál használt variációs módszerekkel megoldani, mivel a hullámfüggvény nem négyzetesen integrálható. Rezonanciák számítására alkalmas a CAP technika, ahol egy komplex abszorpciós potenciált adunk a Hamilton operátorhoz, ami elnyeli a hullámfüggvény kimenő részét. A módszer hátránya, hogy nehezen automatizálható, sok emberi munkát és szubjektív megítélést igényel.

Az általunk kifejlesztett ETC [2] egy CAP alapú félautomatikus módszer a molekulák rezgési-forgási rezonancia állapotainak meghatározására. A módszer alapja egy Tremblay és Carrington [3] által kifejlesztett technika. Itt az eredeti Hamilton operátor mátrixát építjük fel egy megfelelő bázison és a rezonanciákat ennek a kisméretű mátrixnak a sajátértékeiből határozzuk meg. A bázist egy CAP Hamilton-operátor bizonyos sajátvektorai alkotják. Az ETC módszert először az Ar·NO⁺ komplex rezgési rezonanciáin teszteltük, majd a (H₂)₂ van der Waals dimer rezgési-forgási állapotait tanulmányoztuk. Ez utóbbi egy gyengén kötött komplex, a H₂ forgási gerjesztései túllépik az első disszociációs határt, de vannak kötött állapotai és rezonanciái az első disszociációs határon túl, ahol a H₂ molekulák gerjesztett forgási állapotban vannak. A kötött állapotokat a GENIUSH programmal számítottuk ki, a rezonanciákat a hagyományos CAP módszerrel (GENIUSH-CAP [4]) és az ETC technikával is meghatároztuk. Az ETC módszerrel kapott rezonanciák jól egyeznek GENIUSH-CAP programmal számoltakkal, így az ETC egy jó, félautomatikus alternatívája a CAP módszernek.

[1] N. Moiseyev; *Non-Hermitian Quantum Mechanics*; **2011**

[4] I. Simkó, T. Szidarovszky, A. G. Császár; *Journal of Chemical Theory and Computation*, **2019** (15) 4156-4169

[3] J. C. Tremblay, T. Carrington; *Journal of Chemical Physics*, **2005** (122) 244107

[4] D. Papp, T. Szidarovszky, A. G. Császár; *Journal of Chemical Physics*, **2017** (147) 094106

ENGLISH SECTION I.

OPTIMIZING NOBEL METAL FREE CATALYSTS FOR CO₂ ACTIVATION TOWARDS HIGH ACTIVITY AND SELECTIVITY

Anastasiia Efremova^a, András Sápi^a

*^aUniversity of Szeged, Department of Applied and Environmental Chemistry, Rerrich Bela ter 1.
Szeged, H-6720, Hungary*

Chemical recycling of carbon dioxide (CO₂) attaches considerable importance to its utilization, especially nowadays, when the concentration of carbon dioxide is high and continues to grow on a yearly basis. In this study we proposed a solution to CO₂ utilization using cheap nobel metal free catalysts as well as designed catalysts. Carbon dioxide was activated with hydrogen and with methane.

The activities of synthetically obtained 0.5% Pt/SBA-15, mesoporous NiO, 0.5% Pt/NiO as well as of commercial Co₃O₄ catalysts were studied in continuous flow fixed-bed reactor with He and Ar carrier gases. Being the reference measurement, 0.5% Pt/SBA-15 showed low activity in both carbon dioxide hydrogenation and dry reforming of methane reactions. Mesoporous NiO demonstrated good activity in CO₂ hydrogenation reaction with high CO₂ conversion (80% at 610K), consumption rate (17000 nmol/gs at 638K) and methane selectivity. In contrast, Pt/NiO showed slightly worse performance but was methane selective as well. In DRM reaction mesoporous NiO was distinguished with remarkable activity – CO₂ consumption rate was 5.5 times higher than that in CO₂ hydrogenation reaction while Pt/NiO was considerably less active. Activity deteriorating effects for Pt nanoparticles were explained by the fact that the latter provide additional reduction of NiO on the interface, which was supported by TPR-measurements. Development of cheap nobel metal free catalysts was proposed. In this regard, cheap pristine support (commercial Co₃O₄) was tested in CO₂ activation reactions at different reduction temperatures (473K, 573K, 673K) and being reduced at 473K, showed the highest conversion values in hydrogenation reaction (66% at 648 K). All three catalytic systems demonstrated high percentage of methane selectivity. However, they turned out to be inactive in carbon dioxide reforming of methane reaction and unwanted high ratios of CO/H₂ were observed.

The catalytic results emphasized the importance of nature of metal/metal oxide interface. Nobel metal free catalytic systems composed of pristine metal oxide supports providing enhanced activity and selectivity may be developed on account of finding the optimal balance of Me/MeO on the interface by varying reduction and pretreatment conditions.

Keywords: mesoporous oxide, Pt nanoparticles, CO₂ hydrogenation, dry reforming of CH₄.

QUANTITATIVE ANALYSIS OF THE TRYPTOPHAN METABOLITES IN MULTIPLE SCLEROSIS BY UPLC-MS-MS

Ferenc Tömösi^a, Gábor Kecskeméti^a, Edina Cseh^b, Elza Szabó^b, Cecília Rajda^b, Róbert Kormány^c, László Vécsei^{b,d} and Tamás Janáky^a

^a*Department of Medical Chemistry, Interdisciplinary Excellence Centre, University of Szeged, Dóm tér 8, 6720*

^b*Department of Neurology, Interdisciplinary Excellence Centre, University of Szeged, Semmelweis u. 6, 6725*

^c*Egis Pharmaceuticals Plc., Keresztúri út 30-38, 1106 Budapest, Hungary*

^d*Hungarian Academy of Sciences, MTA-SZTE Neuroscience Research Group, Semmelweis u. 6, 6725 Szeged*

The simultaneous quantitative measurement of tryptophan metabolites is a great challenge due to their diverse chemical properties, e.g. having acidic, basic and nonpolar functional groups and the immensely different concentration levels in the biological matrices such as serum and cerebrospinal fluid (CSF).

A short UPLC-tandem mass spectrometry method was developed for targeted analysis of twelve most important tryptophan metabolites (serotonin - SERO, kynurenine - KYN, 3-hydroxyanthranilic acid - 3-HANA, tryptophan - TRP, 5-hydroxyindoleacetic acid - 5-HIAA, anthranilic acid - ANA, kynurenic acid - KYNA, 3-hydroxykynurenine - 3-HK, xanthurenic acid - XA, melatonin - MELA, picolinic acid - PICA and quinolinic acid - QUIN) in human CSF. To achieve absolute quantification deuterium-labeled internal standards were used. Three metabolites were analysed in derivatized form (3-HK, PICA and QUIN) together with nine underivatized ones. DryLab[®]-4 software was applied to select optimal conditions (column, organic modifier, pH of the mobile phase, gradient length and temperature) for separation of these metabolites. Following the official guidelines, a validation process was carried out to determine the intra- and inter-day precision, accuracy and sensitivity of the developed method.

To demonstrate the robustness of our UPLC-MS/MS method, these tryptophan metabolites were analysed in serum and CSF samples from control persons and patients with multiple sclerosis. Although some changes in tryptophan metabolite profile were associated with multiple sclerosis [1], we decided to investigate a wider range of metabolites in order to find biomarker(s) for early diagnosis of the disease. Compared to the control group a dramatic increase of QUIN and decrease of KYNA concentration was observed in the multiple sclerosis group, resulting in a significant rising of QUIN/KYNA ratio.

[1] N. Török, Z. Majláth, F. Fülöp, J. Toldi, L. Vécsei, *Current Drug Metabolism*, **2016** (5) 412-429 .

Acknowledgement: This work was supported by the 20391 3/2018/FEKUSTRAT project and GINOP-2.3.2-15-2016-00034.

**ANTITUMOR COPPER COMPLEXES OF SALICYLALDEHYDE
THIOSEMICARBAZONES:
SOLUTION CHEMISTRY AND BIOLOGICAL ACTIVITY**

Tatsiana Petrasheuskaya,^a Orsolya Dömötör,^a Gabriella Spengler,^b Annamária Kincses,^b Nóra V. May,^c Márton A. Kiss,^d Éva Franks,^d Éva A. Enyedy,^a

^{a)} Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Interdisciplinary Excellence Centre, University of Szeged, Dóm tér 7, H-6720, Szeged, Hungary

^{b)} Department of Medical Microbiology and Immunobiology, University of Szeged, Dóm tér 10, H-6720, Szeged, Hungary

^{c)} Research Centre for Natural Sciences Hungarian Academy of Sciences, Magyar tudósok körútja 2, H-1117 Budapest, Hungary

^{d)} Department of Organic Chemistry, University of Szeged, Dóm tér 8, H-6720, Szeged, Hungary

Salicylaldehyde thiosemicarbazone (STSC) and its simple derivatives usually exhibit only low cytotoxic activity against tumor cells; however, their copper(II) complexes are often much more active [1], most probable due to their high stability and redox properties. In this study, seven novel copper(II) complexes with steroidal TSC derivative, estrone-TSC and a simpler structurally-related bicyclic compound, a new 5,6,7,8-tetrahydro-1-naphthol-based molecule and their differently methylated derivatives were synthesised and characterised by spectroscopic methods (UV-visible spectrometry, EPR spectroscopy, fluorimetry) and ESI mass spectrometry. The ligands and complexes were tested in four human cancer cell lines, namely doxorubicin-sensitive (Colo 205), multidrug resistant (Colo 320) human colonic adenocarcinoma cell lines, in a breast cancer cell line (MCF-7) and normal human embryonal lung fibroblast cells (MRC-5). The proton dissociation processes of the ligands and stability of the copper(II) complexes were investigated in pure aqueous solution or in a 30% (v/v) DMSO-H₂O solvent mixture by UV-visible titrations. In addition, the lipophilicity, membrane permeability and direct redox reaction of the complexes with the physiological reductants was also monitored under anaerobic conditions. Some of the copper(II) complexes revealed promising anticancer properties.

[1] E.A. Enyedy, E. Zsigó, N.V. Nagy, C.R. Kowol, A. Roller, B.K. Keppler, T. Kiss, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2012** (2012) 4036-4047.

Acknowledgements:

National Research, Development and Innovation Office-NKFIA projects GINOP-2.3.2-15-2016-00038, FK 124240 and FIKP program TUDFO/47138-1/2019-ITM .

LAYERED DOUBLE HYDROXIDES FOR REMEDIATION OF MINING WASTEWATERS

Zoltán Somosi,^{a,b} Szabolcs Muráth,^{a,b} Péter Nagy,^a István Szilágyi,^{a,b} and Grant Douglas^c

^a*MTA-SZTE Lendület Biocolloids Research Group, University of Szeged, H-6720 Szeged, Hungary*

^b*Interdisciplinary Excellence Center, Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged, H-6720 Szeged, Hungary*

^c*Centre for Environment and Life Sciences, CSIRO Land and Water, WA, 6913 Wembley, Australia*

The efficient removal of a range of anionic and cationic contaminants from acid mine waters to facilitate water reuse or for safe discharge constitutes a major environmental challenge. Layered double hydroxides (LDHs) are anionic clays composed of mixed positively charged lamellar metal hydroxides and charge compensating anions between the layers. Recently LDH-type materials have shown considerable efficacy at experimental and full-scale for mine water treatment [1]. Numerous studies document LDH as an adsorbent for different contaminants present in wastewaters, but few consider the removal efficiency of the spent adsorbent. In the present work, LDH-type materials were prepared in-situ under different experimental conditions with a method for their separation also developed. The medium for the synthesis was wastewater from a Western Australian gold mine. This work demonstrated that an interlinked network of smaller LDH aggregates was formed during synthesis leading to the development of stable colloids. Different approaches were tested to separate the solid materials containing the captured contaminants from the solute. Different charging agents; negatively charged polyelectrolytes (poly(styrene sulfonate) and dextrane sulfate) and phosphate anions adsorbed strongly on the slightly positively charged particle networks causing charge neutralization and overcharging, however, destabilization of the stable dispersions was unsuccessful. Diluting the samples led to rapid sedimentation and separation of the LDH phase, which facilitated higher solute recoveries. This study gives an insight into in-situ formation of LDH in both model and in mine water systems enhancing the understanding of adsorption, sedimentation and colloidal properties during the removal process.

[1] Douglas, G.; Shackleton, M.; Woods, P., *Appl. Geochem.* **2014** (42) 27-37.

Financial support by the Lendület program of the Hungarian Academy of Sciences (96130) and by the Ministry of Human Capacities, Hungary (20391-3/2018/FEKUSTRAT) is acknowledged.

1,4-DIOXANE INDUCED STRUCTURAL CHANGES OF BIOMEMBRANE MODELS INVESTIGATED BY MOLECULAR DYNAMICS AND METADYNAMICS SIMULATIONS

Zsófia Borbála Rózsa^a, Lukács J. Németh^b, Balázs Jójárt^b, Károly Nehéz^c, Béla Viskolcz^a, Milán Szóri^a

^a Institute of Chemistry, University of Miskolc, Egyetemváros A/2, H-3515 Miskolc, Hungary

^b Department of Food Engineering, Faculty of Engineering, University of Szeged, Mars tér 7. H-6724, Szeged, Hungary

^c Department of Information Engineering, University of Miskolc, Miskolc-Egyetemváros Informatics Building, H-3515 Miskolc, Hungary

1,4-dioxane is a cytotoxic B2 type human carcinogen, a serious water pollutant produced solely by industrial activity. The effect of 1,4-dioxane on phospholipid membrane models composed by DPPC and its branched isomer (IPPC) was investigated using Molecular Dynamics and metadynamics simulations. During our simulations 1,4-dioxane was found to be able to penetrate inside both types of biomembranes. Clear and polluted membranes were compared by membrane structural parameters such as APL, VPL, compressibility modulus, membrane thickness and orderliness of lipid tails. While neat systems significantly differ from each other, the presence of the pollutant has the same effect on both types of lipid membranes. Orientational preferences of water and dioxane molecules were also investigated and different membrane regions have been specified according to the stance of water molecules. Free energy profile for 1,4-dioxane penetration mechanism into DPPC membranes was carried out using metadynamics for two different concentrations of the pollutant ($c_1=7.51$, $c_2=75.10$ g/dm³), which showed that the higher the concentration is, the lower the free energy of penetration gets. The penetration mechanism has been described in detail based on the orientational preference of 1,4-dioxane molecules and the free energy profile.[1]

[1] Z. B. Rózsa, L. J. Németh, B. Jójárt, K. Nehéz, B. Viskolcz, and M. Szóri, *Journal of Physical Chemistry B*, **2019** (123), 7869–7884.

This study was supported by the European Union and the 892 Hungarian State, co-financed by the European Regional 893 Development Fund in the framework of the GINOP-2.3.4- 894 15-2016-00004 project, aimed to promote the cooperation 895 between the higher education and the industry.

ADSORPTION OF FORMAMIDE AT THE SURFACE OF AMORPHOUS AND CRYSTALLINE ICES UNDER INTERSTELLAR AND TROPOSPHERIC CONDITIONS

Bálint Kiss^a, Sylvain Picaud^b, Milán Szóri^c and Pál Jedlovszky^d

^a*Institute of Chemistry, University of Miskolc, Egyetemváros A/2, H-3515 Miskolc, Hungary.*

^b*University of Lille, Faculty of Sciences and Technologies, LASIR (UMR CNRS 8516), 59655 Villeneuve d'Ascq, France.*

^c*Institut UTINAM (CNRS UMR 6213), Université Bourgogne Franche-Comté, 16 Route de Gray, F-25030 Besançon, France.*

^d*Department of Chemistry, Eszterházy Károly University, Leányka u. 6, H-3300 Eger, Hungary*

The adsorption of formamide was studied with grand canonical Monte Carlo (GCMC) simulation at the surface of crystalline (I_h) ice at 200 K and at the surface of low density amorphous (LDA) ice at the temperature of 50 K, 100 K and 200 K. The investigated systems are significant in the troposphere and in the interstellar medium (ISM).

The results show no considerable amount of formamide dissolved in the bulk ice phase in any case. The adsorption of formamide at the ice surface under these conditions is a very strongly preferred process, which has to be taken into account when studying the chemical reactivity in these environments. We found multimolecular layer adsorption, which occur precedes the saturation of the first molecular layer. Due to the strong lateral interaction acting between the adsorbed formamide molecules, the adsorption isotherm does not follow the Langmuir shape. Adsorption is found to be slightly stronger on LDA than I_h ice under identical thermodynamic conditions, due to the larger surface area exposed to the adsorption. During the examination of the molecules in the first adsorbed layer of formamide, we found a very strongly bounded system to the ice surface, forming typically four hydrogen bonds with each other and the surface water molecules. The preferred orientation of the formamide molecules show parallel arrangement with both ice surface.

This research was supported by the European Union and the Hungarian State, co-financed by the European Regional Development Fund in the framework of the GINOP-2.3.4-15-2016-00004 project, aimed to promote the cooperation between the higher education and the industry.

A MECHANISTIC INVESTIGATION OF BENZO(A)PYRENE FORMATION WITH ACETYLENE ADDITIONS

Reizer Edina^a, Imre G. Csizmadia^b, Béla Fiser^c

^a*Institute of Chemistry, University of Miskolc, Miskolc-Egyetemváros, H-3515 Miskolc, Hungary;*

^b*Department of Chemistry, University of Toronto, Ontario, Canada, M5S 1A1*

^c*Ferenc Rákóczi II. Transcarpathian Hungarian Institute, UA-90200 Beregszász, Transcarpathia, Ukraine*

The investigations of the pollutants emitted by the fossil-fueled combustion processes gain increasing attention. Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH) belong to such toxic chemicals, with a major concern regarding their formation mechanisms. The science of these molecules has importance on numerous research fields, however their examinations are mostly related to the problem of soot emission. PAH molecules are considered as precursors of soot, due to the similarities in their chemical structures. This fact aroused the desire of the combustion society to understand deeply the mechanism of PAHs in order to get a better insight into the formation and further growth of soot particles. As time passed several PAH reaction mechanisms were proposed, based on experimental and theoretical results, and these were also implemented in better and better soot growth prediction kinetic models. The reaction frameworks of PAHs with up to 3 rings are well-established, however, the reaction channels of bigger PAHs are severely incomplete. This work targets to reduce this lack of knowledge with the investigation of the reaction mechanism of benzo(a)pyrene, a PAH with 5 aromatic rings. To achieve this, a three type of reaction mechanism were employed, all of them with the addition of acetylene or acetylene radical as major steps. The elementary steps of the chemical pathways were examined by density functional theory methods [B3LYP/6-31+G(d,p) and M06-2X/6-311++G(d,p)]. The reactions started from chrysene and benzo(a)anthracene, which are less toxic than the final product as they are containing only four aromatic rings. The obtained results show that energetically the pathways from the two starting materials are very similar to each other, and the benzo(a)pyrene could be reached through both reactants.

Acknowledgments

The GITDA (Governmental Information-Technology Development Agency, Hungary) is gratefully acknowledged for allocating computing resources used in this work. This research was supported by the European Union and the Hungarian State, co-financed by the European Regional Development Fund in the framework of the GINOP-2.3.4-15-2016-00004 project, which aimed to promote the cooperation between the higher education and the industry. B.F. thanks the support by the National Talent Program (HU) “National Youth Talent Scholarship” under the NTP-NFTÖ-18-B-0336 project.

KÖRNYEZETI- ÉS RADIOKÉMIAI SZEKCIÓ

LÍTIUM-KLORID, MINT ATKAELLENES SZER – LEHETŐSÉG VAGY KOCKÁZAT?

Sajtos Zsófi^{a,b}, **Kolics Éva**^c, **Mátyás Kinga Klára**^c, **Taller János**^c, **Kolics Balázs**^c,
Burik Petra^b, **Baranyai Edina**^b

^a Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Kémiai Doktori Iskola,

^b Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék,
Atomspektroszkópiai Partner Laboratórium,

^c Pannon Egyetem; Georgikon Kar, Növénytudományi és Biotechnológiai Tanszék

E-mail: sajtos.zsofi@science.unideb.hu

Az elmúlt évtizedekben a beporzó rovarok rohamos pusztulása világviszonylatban is fenyegető jelenség a humán élelmezés tekintetében, amelyet sokszor a vegyszerintenzív termelés számlájára írunk. A méhek egészségét azonban nem csupán a peszticidek veszélyeztetik, legalább akkora mértékben okozza elhullásukat a változatos méhlegelők hiányából adódó alultápláltság, valamint a háziméh (*Apis mellifera*) ektoparazitája, az ázsiai méhatka (*Varroa destructor*), amely kezelése a globális méhészet legnagyobb problémáját okozza. A forgalomban lévő atkaellenes vegyszerekre nézve az évek során a *Varroa* atkák immunitást szerezvén rezisztenssé váltak, hatalmas kockázatnak kitéve ezzel a mérsékelt övi méztermelést és növénytermesztést. Egy német kutatócsoport 2018 év elején ígéretes alternatívát fedezett fel, mely forradalmi újítást hozhat a *Varroózis* kezelésében. A méhek etetésére használt cukorszirupba kevert lítium-klorid hatékony és könnyen kezelhető megoldást nyújthat az atkafertőzés ellen, mivel szelektíven pusztítja a parazitaszervezetet anélkül, hogy a méhekét károsítaná. A pontos hatásmechanizmus azonban még nem ismert és a mézekben, valamint a méhészeti termékekben megjelenő esetleges szermaradványokat is vizsgálni kell.

Ebben a tanulmányban célul tűztük ki a lítium-klorid akkumulációs útjának vizsgálatát, a lítiumsóval kezelt kaptárokból származó méhek, illetve méhészeti termékek analízise révén. A kísérlet során egy kontroll és négy kezelt méhcsaládot vizsgáltunk, a kezelt méhcsaládokat 25mM koncentrációjú lítium-kloridos cukorsziruppal etettük, miközben más szénhidrátforrás nem állt rendelkezésükre. A minták lítiumtartalmának meghatározására egy rutinanalízis számára is könnyen adaptálható minta-előkészítési és mérési módszert fejlesztettünk, melyet a költségghatékony elemanalízist biztosító mikrohullámú plazma atomemissziós spektrométerre (MP-AES) optimalizáltunk.

Megállapítottuk, hogy a lítium eloszlik a méhek testében, megjelenik a garatmirigyben, eljut a méhek lábaiba, amelyek a külön-külön történő mintavételezéskor, vagy a kaptártörmelékből összegyűjtve megfelelő anyagot szolgáltathatnak a kaptárban lévő lítium szintjének monitorozására. Azt tapasztaltuk, hogy a lítium-klorid kis koncentrációban bekerül az emberi fogyasztásra szánt mézbe, illetve a közelben lévő nem kezelt kaptárokból is megjelenik a kezelés korai szakaszában, a dezorientált méhek révén. Mindezek mellett kísérleteink megerősítették a LiCl miticid hatását, így ez a szer alternatívája lehet a szintetikus atkaellenes vegyszereknek, melyek szermaradványai hosszú ideig jelen lehetnek kaptárban

Köszönetnyilvánítás: Az elemanalitikai mérések elvégzéséhez szükséges ICP-OES és MP-AES készülékeket az Agilent Technologies Inc. (Novo-Lab Kft) bocsátotta rendelkezésünkre. A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008, GINOP-2.3.2-15-2016-00054 és EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

SZULFAMETAZIN ÁTALAKÍTÁSA UV ÉS UV/VUV FOTOLÍZISSEL, ÓZONOS KEZELÉSSSEL ÉS UV/ÓZON KOMBINÁCIÓJÁVAL

Farkas Luca¹, Ilaria Monzini², Náfrádi Máté¹, Fuderer Dalma¹, Alapi Tünde¹

¹*Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged*

²*University of Padova, Department of Chemical Sciences, Padova*

Az antibiotikumok túlzott mértékű használatának köszönhetően napjainkban már nem csak, mint nélkülözhetetlen gyógyszerek, hanem a környezet igen veszélyes szennyezőiként is ismertté váltak. Az antibiotikumok jelentős része változatlanul, részlegesen tovább alakulva, vagy metabolitok formájában távozik az élő szervezetből, elsősorban az emberek és az állatok vizeletében és bélsarában választódva ki. A szennyvízkezelés jelenleg alkalmazott módszerei azonban nem képesek a szennyvizetekbe bekerülő antibiotikumokat ártalmatlanítani, így azok kijutathatnak a környezetünkbe. Ennek egyik következménye, hogy az elmúlt évtizedekben az antibiotikum-rezisztens baktérium törzsek száma jelentősen megnőtt, ami beláthatatlan következményekkel járhat.

Munkánk során a víztisztításban jelenleg is használt additív módszerek közül vizsgáltuk az UV (254 nm), UV/VUV (254/185 nm) fotolízis, az ózonos kezelés, illetve annak UV fotolízissel való kombinációjának hatékonyságát a szulfametazin átalakulása szempontjából. A szulfametazin hatékonyan átalakítható közvetlen fotolízissel is, azonban a köztitermékek jelentős része ebben az esetben nem alakul át, a besugárzott oldat KOI értéke nem csökken. UV/VUV fotolízis során, a képződő hidroxilgyököknek köszönhetően az átalakulás sebessége megnő, és végbemegy a mineralizáció is. Az ózon meglehetősen szelektív oxidálószer, szerves vegyületekkel lejátszódó reakciók sebességi állandóinak értéke széles skálán mozog. A szulfametazinnal igen gyorsan elreagál, a KOI csökkenése azonban egy idő múlva megáll, ami ózonnal nem reagáló köztitermékek képződésére utal. UV fotolízissel kombinálva az ózonos kezelést, a szulfametazin átalakulási sebessége csak kismértékben nőtt, ugyanakkor a mineralizáció sebességére pozitív hatással volt. Egy vízkezelési módszer hatékonysága nem csupán a célvegyület átalakulási sebességével jellemezhető, hanem a cél elérése érdekében befektetendő energiaigénnyel is. Ennek megfelelően eredményeink alapján összehasonlítottuk az alkalmazott módszerek elektromos energia felhasználását is, felhasználva a J. Bolton által kifejlesztett modellt.

Köszönetnyilvánítás

Alapi Tünde köszöni a támogatást a Magyar Tudományos Akadémia Bolyai János Kutatási Ösztöndíjának. Az innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3-SZTE-207 és ÚNKP-19-4-SZTE-115 kódszámú Új Nemzeti Kiválósági Programjának támogatásával készült.

A HIPOKLÓROSSAV REAKCIÓJA AMINOSAVAKKAL: KÉPZŐDÉS- ÉS BOMLÁSKINETIKA

Simon Fruzsina^a, Szabó Mária^a, Fábíán István^{a,b}

^aSzervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, Debrecen, Egyetem tér 1., Magyarország, 4032

^bMTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debreceni Egyetem, Debrecen, Egyetem tér 1., Magyarország, 4032

A hipoklórossav és az aminosavak közvetlen reakciójában *N*-klóraminosavak keletkeznek. A klóraminok kémiája két területen kiemelkedő. Egyrészt a vizeket szennyező vírusok, gombák és baktériumok elpusztítására főként klórt vagy hipoklórossavat használnak. A vizekben jelenlévő ammónia és szerves aminok az előzőekben említett fertőtlenítőszerrel reagálnak és *N*-klóraminok képződnek, amelyek másodlagos fertőtlenítőszernek tekinthetők. [1,2].

Az élő szervezetben levő kloridion és hidrogén-peroxid mieloperoxidáz enzim által katalizált reakciójában hipoklórossav képződik, ami fehérjékkel, peptidokkal, aminosavakkal reagál és szintén *N*-klóraminok megjelenését eredményezi. A hipoklórossavnak és a klóraminoknak is meghatározó funkciója van a szervezet gyulladással szembeni védelmében [3].

Az irodalomban viszonylag kevés biztos eredményt találunk az *N*-klóraminosavak képződésével és bomlásával kapcsolatban. Ezért 17 fehérjealkotó aminosav hipoklórossavval lejátszódó reakciójában részletes kinetikai vizsgálatokat végeztünk pH 3-13 közötti tartományban.

A klóraminok a gyors képződést követően egy viszonylag lassú folyamatban elbomlanak. A bomlási reakció során keletkező termékeknek alapvető jelentősége van a *N*-klóraminosavakhoz rendelhető élettani hatások értelmezésében. Részletes kinetikai vizsgálatokat végeztünk az α -alaninból, illetve az elágazó láncú aminosavakból keletkező *N*-klóraminosavak bomlására vonatkozóan és a folyamat során keletkező termékeket is azonosítottuk.

[1] G. C. White, *Handbook of Chlorination and Alternative Disinfectants*; Van Nostrand Reinhold: New York, **1992**.

[2] M. Deborde; U. von Gunten, *Water Res.* **2008**, 42, 13.

[3] J. M. Pullar; M. C. M. Vissers; C. C. Winterbourn, *IUBMB Life* **2000**, 50, 259.

Az anyagi forrásért köszönetet mondok az OTKA K 124983 számú pályázatnak.

A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának

szakmai támogatásával készült.

A Richter Gedeon Talentum Alapítvány (1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.) anyagi támogatásával jött

létre.  RICHTER GEDEON

NEONIKOTINOID TARTALMÚ VIZEK HETEROGÉN FOTOKATALITIKUS KEZELÉSE

Náfrádi Máté, Hlogyik Tamás, Dr. Alapi Tünde

Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged

Az utóbbi években jelentős figyelmet kaptak a neonikotinoid inszekticidek, elsősorban a mézelő méhekre gyakorolt toxikus hatásuk miatt. Munkánk célja volt két, elterjedten és nagy mennyiségben használt neonikotinoid, az imidakloprid és tiakloprid fotokatalitikus átalakításának vizsgálata, TiO_2 katalizátort használva, valamint eredményeink összehasonlítása a szakirodalommal.

Az általunk alkalmazott körülmények között az imidakloprid és a tiakloprid egyaránt közel 30 perc alatt teljesen átalakul, ám számos köztitermék marad a besugárzott szuszpenzióban, annak ellenére, hogy heterogén fotokatalízis során többnyire a szerves vegyületek átalakulása és mineralizációja közel egyidejűleg, párhuzamosan történik. Vizsgáltuk az imidakloprid kiindulási koncentrációjának, a TiO_2 szuszpenzió töménységének és az oldott O_2 koncentrációjának hatását. Mérési eredményeinkre jól alkalmazható volt mind a Langmuir-Hinshelwood, mind a Freundlich modell. Az O_2 koncentrációjának növelése 10 t^o% felett már nem volt szignifikáns hatással az átalakulási sebességre. A peszticid hatóanyagok és köztitermékek dehalogenizációja teljes mértékben lejátszódik a hatóanyagok átalakulásának ideje alatt. A teljes szerves széntartalom (TOC), illetve a kémiai oxigénigény (KOI) csökkenésével jellemezhető a mineralizáció hatékonysága. Mindkét vegyület esetén a KOI és TOC értékek csökkenése jelentősen lelassult a célvegyületek átalakulása után, ami nehezen oxidálható köztitermékek képződésére utal. A nitrogéntartalom nitráttá alakulását csak imidakloprid esetén tudtuk kimutatni, ebben az esetben is csak a teljes nitrogén tartalom 25 %-a volt kimutatható nitrátként. Ez utóbbi megerősíti, hogy a heterogén fotokatalízissel nehezen átalakuló köztitermékek valószínűleg nitrogén tartalmú szerves vegyületek.

A publikáció a Bolyai János Kutatói Ösztöndíj valamint az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3-SZTE-207 és UNKP-19-4-SZTE-115 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.

CIKLOTRONNAL ELŐÁLLÍTOTT ^{44}Sc RADIOJELZÉSI HATÉKONYSÁGÁNAK OPTIMALIZÁLÁSA

Forgács Viktória^a, Leskó Máté^a, Szikra Dezső^a

^aDebreceni Egyetem ÁOK Orvosi Képző Intézet Nukleáris Medicina Nem Önálló Tanszék
4032 Debrecen, Nagyerdei krt. 98., e-mail: forgacs.viktoria@med.unideb.hu

A pozitronemissziós tomográfias (PET) vizsgálat során meghatározható a szervezetbe juttatott radioaktív pozitronbomló izotópok bomlásának pontos helye, mely során képet alkothatunk a pozitron-annihilációs események segítségével. Peptidek, fehérjék és antitestek esetén a fémizotópokkal való jelzés gyakran előnyösebb, mint a rövid felezési idejű ^{18}F és ^{11}C izotópok használata. A radiofémek közül kedvező tulajdonságaival kiemelkedik a ciklotronnal is előállítható szkandium-44 (^{44}Sc , $t_{1/2} = 3,97$ h)[1]. Felhasználását az előállítás során keletkező- illetve bele kerülő szennyező fémionok nehezítik. Munkánk célja a "hideg" és a radioaktív fém-szennyezők kvalitatív- és kvantitatív meghatározása, és ezek mennyiségének minimálisra csökkentése volt.

A ^{44}Sc -ot saját készítésű szilárd target rendszer segítségével állítottuk elő, természetes izotópösszetételű fém kalcium besugárzásával ($^{44}\text{Ca}(p,n)^{44}\text{Sc}$)[2]. A pozitronbomló izotópokat gammaspektrométerrel, míg a hideg fémionokat ionkromatográfiásan azonosítottuk, utóbbihoz kolonna utáni komplexképzéssel választottuk el és tettük detektálhatóvá a szennyező fémionokat. A radionuklidos azonosítás során az átlagos összetétel a DGA ioncserélő gyantán való tisztítás után: 98,48% ^{44}Sc és 1,52% ^{44m}Sc . Az ionkromatográfiás mérések során komplexképzőként PAR (4-(2-piridilazo)rezorcinol) reagenst, míg eluensként PDCA (piridin-2,4-dikarboxilsav) alkalmazva jellemzően inaktív Zn^{2+} és Fe^{3+} jelenlétét tapasztaltuk, 0,05 – 0,10 ppm koncentrációtartományban Dionex IonPac CS5A oszlopon. Ezt követően makrociklusos komplexképzőt (DOTA) használtunk modellvegyületként a jelzési reakció tesztelésére. A jelzési határfok meghatározására általánosan alkalmazható folyadékkromatográfiás módszert dolgoztunk ki, ahol a szabad fémion jól elkülöníthető a jelölt komplextől. Kitapadás vizsgálatok során KNO_3 -ot és oxálsavat tartalmazó eluens bizonyult a leghatékonyabbnak (99,4%).

Sikerült megvalósítani a ^{44}Sc rutinszerű előállítását ciklotronban. Módszereket dolgoztunk ki a szennyező fémek meghatározására és eltávolítására, mellyel növelhető a jelölés határfoka. A kidolgozott folyadékkromatográfiás elválasztás alkalmas a TLC kiváltására, gyorsítva és egyszerűsítve a sorozatméréseket, csökkentve a sugárterhelést, valamint növelve az eredmények reprodukálhatóságát.

[1] N. C. Grignon et al., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, **2007** (571) 142–145.

[2] S. Krajewski et al., *Radiochimica Acta*, **2013** (101) 333–338.

SPECIFIKUS KÖLCSÖNHATÁSOK ALAPJÁN DÚSULÓ PET RADIOFARMAKONOK TERVEZÉSE

Dénes Noémi^a, Trencsényi György^a, Kis Adrienn^a, P. Szabó Judit^a, Berényi Ervin^a, Mező Gábor^b, Hunyadi János^c, Kertész István^a

^aDebreceni Egyetem, ÁOK, Orvosi Képző Intézet, Nukleáris Medicina Nem Önálló Tanszék

^bMTA-ELTE, Peptidkémiai Kutatócsoport

^cDebreceni Egyetem, Bőrgyógyászati Klinika

Hazánkban a daganatos betegségek jelentik az egyik vezető halálokozót. A halálos esetek egy része elkerülhető lenne korai és hatékony diagnosztikai módszerek felhasználásával. A PET képalkotásban jelenleg általánosan használt radiofarmakonok nem specifikus kölcsönhatások alapján dúsulnak a tumoros szövetekben. Ezért célunk, hogy olyan kutatási témában is igyekezzünk a radioligandum-fejlesztésben előre lépni, amely célja a tumorok minél hatékonyabb diagnózisa. A molekuláris célpontunk az angiogenezis. Az érképződés folyamatában, a tumorok áttétképzésében fontos szerepe van az aminosavak N (APN/CD13) [1] molekulának. Az intézetben folyó munka során már kidolgoztunk egy sikeresnek bizonyuló NGR [2] analógot, amelyet gallium-68-cal jelöltünk és specifikus kötődést mutatott a molekuláris célpontokhoz. Ezen eredményeink kapcsán szeretnénk a radiokémiai gyakorlatban még nem használt új APN/CD13 szelektív peptid-származékokat fejleszteni a jobb receptorális tulajdonságok és hatékonyabb képalkotás elérése céljából.

A kutatási munka során célunk négy új APN/CD13 szelektív peptid-származék előállítását, amelyek alkalmasak lehetnek az angiogenezis kimutatására. A vegyületeket kelátorral konjugáltuk. A származékoknál több ponton optimalizált radiojelölést hajtottunk végre Ga-68-cal. A radiojelöléshez ⁶⁸Ge/⁶⁸Ga generátort (Eckert-Ziegler, GalliaPharm® típus) alkalmaztunk. Stabilitás vizsgálatot végeztünk egér szérumban. A négy új APN szelektív származékot a referencia ⁶⁸Ga-NOTA-NGR-el hasonlítottuk össze a receptorális tulajdonságaik vizsgálata céljából B16/F10 tumoros egér modellen miniPET kamera segítségével.

Sikerült előállítanunk négy új Ga-68-cal jelölt peptid-származékot, amelyeket a radiokémiai gyakorlatban eddig még nem használtak, s alkalmasak az angiogenezis megjelenítésére. Biztatók a receptor-kötődési vizsgálatok. A további terveink között szerepel a vegyületek alapos tesztelése *in vivo* körülmények között.

[1] R. Pasqualini, E. Koivunen, R. Kain, J. Lahdenranta, M. Sakamoto, A. Stryhn, R.A. Ashmun, L.H. Shapiro, W. Arap, E. Ruoslahti: *American Association for Cancer Research*, **2000**, 1; 60(3): 722–727.

[2] G. Máté, I. Kertész, K. N. Enyedi, G. Mező, J. Angyal, N. Vasas, A. Kis, É. Szabó, M. Emri, T. Bíró, L. Galuska, Gy. Trencsényi: *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, **2015**, 10, 69, 61-71.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás „Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3-I-DE-195 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.”

A munka az EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00009 projekt támogatásával valósult meg.

ANALITIKAI KÉMIAI SZEKCIÓ

FENANTROLIN-MONO-N-OXID NIKKEL(II)- ÉS RÉZ(II)IONOKKAL ALKOTOTT KOMPLEXEINEK EGYENSÚLYI VIZSGÁLATA

Najóczki Ferenc^a, Sánta Szófia Otília^a, Lihi Norbert^{a,b}, Fábián István^{a,b}

^a Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem

^b MTA-DE Redoxi és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa kutatócsoport
4032, Debrecen, Egyetem tér 1.

najoczki.ferenc@science.unideb.hu, +36 52 512-900/22327

Kutatócsoportunkban már másfél évtizede foglalkoznak a peroxomonoszulfát-ion (PMS, oxon, HSO_5^-) oxidációs reakcióinak kinetikai vizsgálatával. Korábbi munkánk során heterociklusos *N*-oxidok, *N*-oxidációjának kinetikáját (PMS-, pH- és hőmérsékletfüggés) vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy mind a protonált (savas ág), mind a deprotonált szubsztrátumok (semleges ág) oxidációja lejátszódhat és meghatároztuk a párhuzamos utak kinetikai és aktiválási paramétereit [1].

A kinetikai eredményeket felhasználva sikeresen szintetizáltunk 11 különböző mono-*N*-oxid származékot, melyekből csak 2 volt ismert az irodalomban.

Ezen vizsgálataink során tanulmányoztuk az előállított 1,10-fenantrolin-mono-*N*-oxid (phenO) réz(II)- és nikkell(II)ionokkal alkotott komplexeinek sav-bázis tulajdonságait, stabilitási állandóit és ezek alapján a vizes oldatban képződő komplexek koncentráció eloszlását a pH függvényében. Erre a célra a következő módszereket alkalmaztuk: pH-potenciometria, pH-potenciometriával kombinált UV-spektrofotometria és relaxometriás titrálás.

Mindkét fémion esetében a nagy stabilitású biszkomplexek képződése kedvezményezett, $2x(\text{N},\text{O})$ koordinált részecskék alakulnak ki. Ezen komplexek már a fémion – ligandum ekvimoláris oldatában is jelentős mértékben képződnek, amit UV-spektrofotometriás és relaxometriás eredmények is alátámasztanak. A nikkell(II)ionok esetén a biszkomplexek kialakulásának termodinamikai hajtóereje a síknégyzetes geometriájú komplex képződése, míg a réz(II)ionok esetében vélhetően egy tetragonális torzulás okozza a biszkomplex kitüntetett stabilitását.

[1] F. Najóczki, G. Bellér, M. Szabó, I. Fábián *New Journal of Chemistry*, **2017** (41) 9947-9953.

Köszönetnyilvánítás: Kutatásainkat támogatta a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (K-124983 és PD-128326) és az Európai Regionális Fejlesztési Alap GINOP-2.3.2-15-2016-00008 és a GINOP-2.3.3-15-2016-00004.

FLUORESZCENS JELÖLÉSŰ CRP ASSAY FEJLESZTÉSE PAPÍR HORDOZÓN

Jurányi Eszter Petra^a, Dr. Berényi Szilvia^a, Dr. Gyurcsányi Róbert^a

^a *BME Lendület Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport,
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111, Budapest, Szt. Gellért tér 4.*

A C-reaktív protein (CRP) egy plazma fehérje, amely részt vesz a szisztémás immunválasz kialakításában. Gyulladásos folyamatok során megnő a vérben a koncentrációja, ezért diagnosztikai célokra már régóta használják. A CRP lehetőséget nyújt a bakteriális és vírusos eredetű fertőzések megkülönböztetésére is, ezért egy, az orvosi rendelőben is alkalmazható „Point-of-Care” (POC) jellegű diagnosztikai eszköz rendkívül hasznos lehet a terápiás döntések támogatásában, és hozzájárulhat az indokolatlanul felírt antibiotikumok mennyiségének csökkentéséhez.

A papír alapú tesztek jelentősége olcsóságukban és egyszerűségükben áll. Mindemellett a teszt elvégzésére lehetőség nyílik a kórházakban, orvosi rendelőkben vagy akár a betegágy mellett is. A pontos papír alapú POC assay fejlesztésének első lépése lehet egy jól és érzékenyen működő dot blot módszer létrehozása.

Kutatásom során egy fluoreszcens jelölésű fehérje assay-t fejlesztettem papír hordozón CRP nagy érzékenységű kimutatására. Ennek a szendvics komplexnek a felépítése az 1. ábrán látható.

A dot blot assay megvalósításához szükséges előkísérleteket, és optimalizálási lépéseket végeztem el. A kísérleteket a mintatérfogató optimalizálásától kezdtem, majd kiválasztottam leghatékonyabb blokkolószerrel, valamint vizsgáltam, hogy szükséges-e a felület aktiválása az assay megkezdése előtt.

Az Előkísérleteket összesítve kidolgoztam egy protokollt fehérje assay megvalósítására papír hordozó felületén. A kifejlesztett assay koncentráció függését vizsgálva azt kaptam eredményül, hogy a 0,1-2,5 µg/ml-es CRP tartományon belül a válaszjel lineárisan változik, a növekvő koncentráció hatására nő a detektált fényintenzitás.

További munkám során a működő fehérje assay dinamikus tartományának bővítésére végeztem kísérleteket. A mérések során optimalizáltam a befogó antitest koncentrációját, a papír CRP oldattal történő inkubálási idejét, valamint a módosított részecske koncentrációját és az inkubálási időt.

Mivel az optimalizálási kísérletek után sem sikerült a teljes klinikailag releváns tartományt (2-200 µg/ml) elérni, ezért további jelölési módszereket is kipróbáltam. Különböző méretű és spektrális tulajdonságú fluoreszcens nanorészecskék felületét is módosítottam CRP antitesttel, és az így jelölt részecskékkel is vizsgáltam az assay teljesítményét.

A kísérletek során azt tapasztaltam, hogy minden egyes részecskére mások a megfelelő paraméterek, így a különböző nanorészecskék alkalmazása előtt el kell végezni az optimalizálási kísérleteket.

KÖLCSÖNHATÁSOK A TRIETANOL-AMMÓNIUM-ACETÁT IONOS FOLYADÉK VIZES OLDATÁBAN

Bagány Nikolett, Sanja Belić, Milan Vraneš, Slobodan Gadžurić

Újvidéki Egyetem, Természettudományi Kar, Trg Dositeja Obradovića 3, Újvidék, Szerbia

Manapság a legtöbb ipari folyamat során különböző oldószerek vannak használatban, nagy mennyiségben, amik később hulladékként kerülnek ki a kémiai reakciókból. Ezek az oldószerek legtöbbször könnyen párolgó, mérgező, szerves vegyületek, amik szennyezik a környezetet.

Mint ezeknek az oldószereknek az alternatívája jelentek meg a ionos folyadékok. A ionos folyadékok olyan sók, amelyek egy nagy szerves kationból és egy szerves vagy szervesetlen anionból állnak. Legtöbbjük folyékony halmazállapotú már szobahőmérsékleten [1].

A kutatás célja a trietanol-ammónium-acetát és a víz közötti kölcsönhatások kivizsgálása volt, a sűrűség, a viszkozitás és a vezetőképesség mérése alapján.

A kutatás eredményeképpen elmondható, hogy a ionos folyadék vizes oldatának sűrűsége és viszkozitása növekszik a koncentráció növelésével, míg a hőmérséklet növelésével csökken. Az elektromos vezetőképesség nő, mint a koncentráció, mint a hőmérséklet növelésével. A sűrűsége és a vezetőképességre kapott eredmények alapján pedig elmondható, hogy a trietanol-ammónium-acetát vizes oldatban úgy viselkedik, mint „structure making” vegyület a vizsgált koncentrációs és hőmérsékleti tartományban.

[1] M. Lancaster, *Green Chemistry: An introductory text*, Royal Society of Chemistry, **2002** 130-165.

KVARCÜVEG HORDOZÓN KOVALENSEN RÖGZÍTETT KORONAÉTER ALAPÚ DIREKT OPTÓDMEMBRÁN FEJLESZTÉSE ÉS ALKALMAZÁSA Zn²⁺ SPEKTROFLUORIMETRIÁS ANALÍZISÉBEN

Kovács Korinna^a, Vezse Panna^a, Golcs Ádám^a, Tóth Tünde^b, Huszthy Péter^a

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

^b*Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest, 1121 Konkoly-Thege Miklós út 29-33.*

Az utóbbi két évtizedben számos Zn²⁺-szelektív optikai szenzormolekulát szintetizáltak [1-2], továbbá több Zn²⁺ kimutatásra alkalmas optódmembrán került fejlesztésre, melyek nagyrészt az ionofort lágyított PVC membránban fizikailag immobilizálva tartalmazzák [3-4].

A perturbációmentes mérés érdekében fontos, hogy az alkalmazott szenzor ne tartalmazzon kioldódásra hajlamos lágyítószer, így a hagyományos optódmembránok nem alkalmazhatók kellő bizonyossággal. A membránalkotók kovalens rögzítése megoldást jelenthet ezen problémára is, azonban számos előnye ellenére a szakirodalomban csak kevés ezen technikával előállított Zn²⁺-szelektív optikai szenzorról található publikáció [5]. Így napjainkban a kovalens immobilizáción alapuló Zn²⁺-szenzorok fejlesztése továbbra is egy kiaknázandó és kihívásokkal teli kutatási területet jelent.

Korábbi szintetikus munkánk során előállítottunk egy a szakirodalomban eddig még nem közölt, közvetlenül kopolimerizációs reakcióba vihető bisz(akridino)tetraaza-makrociklust. Vizsgáltuk a koronaéter spektroszkópiai tulajdonságait és felhasználási lehetőségeit fémionszelektív optikai szenzormolekulaként. A Zn²⁺-szelektívnek talált ionofort allilcsoportjainak közvetlen fotokatalitikus kopolimerizációjával előzetesen felületmódosított kvarcüveg hordozóhoz kovalens kötésekkel rögzítettük. Az így létrehozott immobilizált direkt optódmembrán hagyományos kvarcküvetébe helyezve lehetőséget biztosít bármely típusú fluoreszcens spektrofotométer potenciális Zn²⁺-szenzorrá történő közvetlen átalakítására.

[1] S. Cao, H. Li, T. Chen, J. Cheng; *Journal of Solution Chemistry*, **2009** (38) 1520-1527.

[2] A. Helal, H-S. Kim; *Tetrahedron Letters*, **2009** (50) 5510-5515.

[3] A. A. Abdel Aziz, H. S. Seda, S. F. Mohamed; *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2016** (223) 566-575.

[4] S. Rastegarzadeh, V. Rezaei; *Sensors and Actuators B: Chemical*, **2008** (129) 327-331.

[5] K. Sarkar, K. Dhara, M. Nandi, P. Roy, A. Bhaumik, P. Banerjee; *Advanced Functional Materials*, **2009** (19) 223-234.

Köszönjük az anyagi támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak (NKFIH K-128473).

MAKROCIKLUS IONOFOR ALAPÚ PLATE-RENDSZERBE ÜLTETETT DIREKT OPTÓDMEBRÁNOK FEJLESZTÉSE ÉS ALKALMAZÁSA NEHÉZFÉMIONOK NAGY ÁTERESZTŐKÉPESSÉGŰ OPTIKAI DETEKTÁLÁSÁBAN

Golcs Ádám^a, Dargó Gergő^a, Balogh György Tibor^a, Tóth Tünde^{a,b}, Huszthy Péter^a

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

^b*Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest, 1121 Konkoly-Thege Miklós út 29-33.*

A számottevő környezeti nehézfémzennyezés, beleértve a kiemelkedően toxikus ólomion jelenléte és az ezzel párhuzamosan emelkedő környezetanalitikai elvárások évtizedek óta a kémiai szenzorok fejlesztésének egyik legfőbb motivációját képezik. Az irodalomban számos példát találunk ólomion-szelektív optikai szenzorokra, azonban az analitikai gyakorlatban máig nem terjedt el széleskörűen az ionofor alapú optódmembránok alkalmazása. Ennek háttérében komplex membránösszetételük, rövid élettartamuk és lassú, esetenként több órás válaszidejük áll.

Kutatómunkánk célját egy plate-rendszerbe épített, lágyított PVC-mátrixanyagú optikai membrán fejlesztése képezi, mely ólomion-szelektív neutrális ionoforként a makrogyűrűbe épített formában *N*-heteroaromás fluorogén egységgel rendelkező, lipofil koronaéter-származékot tartalmaz. A szakirodalomból ismert optikai membránoknál hozzávetőleg egy nagyságrenddel vastagabb (100 µm felett) membránok esetében a nehézfémion-detektlás feltételezésünk szerint ún. kvázi egyensúlyi-állapotban a membránfelületen is lezajlik. Így az alsó kimutatási határ rovására a válaszidő jelentősen lerövidíthető, ezzel párhuzamosan a stabilitás nagyságrendekkel nő. A direkt optód jelleg egyszerűsített membránösszetétel alkalmazását teszi lehetővé, mely végső soron a stabilitás további növekedését és az alkalmazott ionofor lipofilitásánál, illetve reverzibilitásánál fogva a membránok kedvező regenerálhatóságát eredményezi.

A fejlesztett szenzor alkalmasnak bizonyult ólomionok vizes közegből, akár multikomponensű mintákból történő szelektív minőségi kimutatására 4,3-7,0 pH-tartományon, 5×10^{-7} M kimutatási határkoncentráció felett, UV- abszorbancia, valamint látható fény-emisszió detektálás útján 96, illetve 384 wellt tartalmazó UV-transzmittens és fekete platekbe ültetett membránok formájában.

Az eredmények reményeink szerint hozzásegíthetnek a nehézfémzennyezett minták első sorban gyors, szimultán, kvalitatív analízisét célzó robotizálható mérési módszer kidolgozásához.

Köszönet az anyagi támogatásért a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak. (K-128473).

ENGLISH SECTION II.

DESIGN, SYNTHESIS AND ANALYSIS OF NOVEL FLUORESCENT Ca²⁺-SENSOR COMPOUNDS

Attila Csomos^{a,b}, Bence Kontra^{a,b}, Zoltán Mucsi^a

^a Department of Chemistry, Femtonics Inc., Budapest H-1094, Hungary

^b Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest H-1117, Hungary

The field of neuroscience is facing new boundaries thanks to technological improvements of recent decades. Highest resolution, cutting edge techniques used by neuroscientists are still based on optical microscopy. However, different optical microscopes are not able to detect the native tissue itself, nor the cellular activity. For this reason chemical indication is needed to make cells and cellular activity visible. Generally in order to accomplish this, complexing agents are used, that are able to bond to free Ca²⁺-ions. Fluorescence of the used compounds must turn on during the binding process, this way visually indicating the change in free Ca²⁺-ion concentration. A variety of compounds for this purpose are available on the market and are known in the literature, however, new ones are currently under development as well. [1]

During this work, inspired by the most widely used ionophore scaffold (BAPTA), we created four chemo sensor molecules that are built on a novel ionophore scaffold, not yet documented in the literature, nor patented. The synthesis was carried out after a systematic computational preliminary study and the desired molecules were produced in a cca. 100 mg quantity in high purity according to HPLC-MS and NMR analysis. The scaffolds were coupled with a simple model-fluorophore in order to make their comparability better in further analysis. We also synthesized two known ionophore compounds as reference and coupled them with the same model-fluorophore in order to examine the practical usability of the created sensor molecules.[2] As the part of the current study, stability constants with Ca²⁺-ions were measured using fluorescent spectroscopy for all the prepared molecules. The intensity change of the fluorescence during the binding process was also determined for all cases. [3]

As a result, all the created compounds were showing significant activity in the field of binding the Ca²⁺-ions. In the regards of change in fluorescence intensity, two novel compounds were giving satisfactory results. Taking everything into account, one of the created new molecules has very promising properties in every regard to be used in routine neuroscientific practice, while it's synthesis is robust, easy and cheap compared to the currently existing alternatives.

To sum up, our main result is a completely new ionophore scaffold, that is easy and cheap to produce, and its spectral properties and chelate-stability make it a great choice for practical use in calcium-imaging microscopy.

[1] C. Grienberger, A. Konnerth, *Neuron*, **2012**.(73), no. 5, 862–885

[2] I. C. S. Cardoso, A. Amorim, *et al.*, *European J. Org. Chem.*, **2012** (2012), no. 29, 5810–5817

[3] G. Gryniewicz, M. Poenie, R. Y. Tsien, *EBR - Eur. Biopharm. Rev.*, **1985** (260) no. 6, 3440–3450

I would like to say thanks to my supervisor, Zoltán Mucsi for his effort to guide me through this research, and to Femtonics Ltd. for the financial support. I would also like to thank the indispensable help in the synthetic work of Dr. Ruth Deme from Semmelweis University and Szandra Szilágyi, as well as the help of Gábor Galbács and Attila Jancsó from the University of Szeged in the analytical work.

SELF-ASSEMBLY OF BIOMACROMOLECULES ON HALLOYSITE NANOTUBES

Bojana Katana^a, Paul Rouster^b, Istvan Szilagyi^{a,c}

^a MTA-SZTE Lendület Biocolloids Research Group, University of Szeged, H-6720 Szeged, Hungary

^b Institute of Condensed Matter and Nanosciences – Bio and Soft Matter, Université Catholique de Louvain, B-1348 Louvain-la-Neuve, Belgium

^c Interdisciplinary Excellence Center, Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged, H-6720 Szeged, Hungary

Antioxidant enzymes have been considered as the most efficient and selective catalysts in decomposition of reactive oxygen species, which cause severe damage to living organism and to industrial products in manufacturing processes [1]. However, the high sensitivity to the environmental conditions limits their supplementation. Immobilization of enzymes or enzyme mimicking compounds is a promising research direction towards the development of novel biocatalysts possessing the same activity, being more robust and less sensitive than the native enzymes [2]. The aim of the present research was to develop an antioxidant bionanocomposite consisting of halloysite nanotubes (HNT), protamine sulfate polyelectrolyte (PSP) and superoxide dismutase (SOD) enzyme. The main steps were (i) characterization of the dispersion properties of HNT in aqueous medium, (ii) investigation of the charging and aggregation features of HNT in the presence of PSP and (iii) immobilization of SOD on the PSP-functionalized HNT and activity assessment in decomposition of superoxide radicals. PSP adsorbed strongly on the oppositely charged HNTs giving rise to charge neutralization and charge reversal at appropriate doses. The HNT of saturated PSP layer on the surface formed similarly stable colloids than the bare HNT. The SOD enzyme was then immobilized on the PSP-functionalized HNTs through electrostatic, hydrophobic and hydrogen bonding interactions, as revealed by microscopy, spectroscopy and scattering techniques. Enzymatic assays revealed that the SOD kept its function and showed high activity in superoxide radical dismutation upon immobilization. In this way, a stable antioxidant dispersion was obtained, which can be used in applications, where the aim is to reduce oxidative stress in heterogeneous systems.

[1] C. C. Winterbourn, *Nature Chemical Biology*, **2008** (4) 278-286.

[2] J. A. Tainer, E. D. Getzoff, J. S. Richardson, D. C. Richardson, *Nature*, **1983** (306) 284-287.

Acknowledgement

This research was financially supported by the Lendület program of the Hungarian Academy of Sciences (96130) and by the Ministry of Human Capacities, Hungary (20391-3/2018/FEKUSTRAT).

FLOW-DRIVEN CRYSTALLIZATION AND PRECIPITATION KINETICS IN THE LITHIUM-PHOSPHATE SYSTEM

Michael Emmanuel^a, Ágota Tóth^a, and Dezső Horváth^b

^a *Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged*

^b *Department of Applied and Environmental Chemistry, University of Szeged*

Fine tuning of structural form during precipitation is possible through self-organization in flow-driven systems. The formation of calcium oxalate dihydrate is dominant in a flow-driven system as opposed to the stable monohydrates usually obtained in a well-stirred system [1]. Precipitation kinetics of nickel oxalate system has revealed that the induction time is proportional to the square of the reactant concentration suggesting the applicability of regular rate laws. The experimental findings have been tested on a radially evolving pattern obtained in the flow-driven precipitation of nickel oxalate [2]. Furthermore, spatial separation of copper and cobaltous oxalate has also been achieved under flow-driven conditions from the homogeneous aqueous solution of copper and cobaltous salts [3].

Lithium phosphate has been considered as a carbon-dioxide gas sensor and as an end product on the recovery of lithium ion from lithium-ion batteries. Lithium phosphate precipitation study was carried out following a gradient induced mixing in a microchannel from solutions of lithium chloride and sodium phosphate tribasic with various concentrations. To describe the evolving structure, characteristics such as position of contact line or pattern width have been determined. Kinetic study of the homogeneous mixture was also carried out by measuring the turbidity as a function of time in a thermostated UV-vis spectrophotometer.

The results of the experiments have shown that the reactants mix by diffusion through the formation of a characteristic contact line, which diminished with increasing distance from the entry point of the reacting solutions. From the kinetic measurements the dependence of the induction time on the concentration of the phosphate ion was determined which are in good agreement with the results obtained from Classical Nucleation Theory.

[1] B. Bohner, G. Schuszter, O Berkesi, D. Horváth, and Á. Tóth; *Chem. Comm.*, 2014, **50**, 4289

[2] N. Prabha Das, B. Müller, Á. Tóth, D. Horváth, and G. Schuszter; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, **20**, 19768-19775

[3] E.Tóth-Szeles, B. Bohner, Á. Tóth, and D. Horváth; *Cryst. Growth. Des.*, 2017, **17**, 5000-5005

SYNTHESIS OF BI- AND TRIFUNCTIONAL PINANE-BASED CHIRAL SYNTHONS

RAJI Mounir

Institute of Pharmaceutical Chemistry, University of Szeged, 6720, Szeged, Eötvös u. 6.

The synthesis of chiral aminoalcohols and aminodiols has widely been exploited due to their variety of applications. Their chelating ability made them an important role in asymmetric catalysis. In the recent decade monoterpenes have proven a very interesting and cheap source for the stereoselective synthesis of chiral aminoalcohols.[1,2]

Key starting material 3-methylenenopinone was prepared in 2 steps from commercially available (-)- β -pinene applying literature method.[3] The stereoselective reduction of the ketone function in presence of $CeCl_3$ as a catalyst to afforded the key intermediate pinnae-based allylic alcohol. Stereoselective epoxidation of allylic function followed by aminolysis of the resulting oxirane ring served aminodiols library.

O-benzylation of the allylic alcohol and similar transformation as above provided the bifunctional aminoalcohol library.

The stereochemistry of the amino alcohols/diols was determined by 2D-NMR techniques (COSY, NOESY, HSQC and HMBC), and all compounds were tested as ligands for chiral addition of diethylzinc to aldehydes.

[1] Cherng Y-J, Fang J-M, Lu T-J. *The Journal of Organic Chemistry*. 1999; 64: 3207–3212.

[2] Philipova I, Dimitrov V, Simova S. *Tetrahedron: Asymmetry*. 1999; 10: 1381–1391.

[3] Szakonyi Z, Gonda T, Ötvös SB, Fülöp F. *Tetrahedron: Asymmetry*. 2014; 25: 1138–1145.

SYNTHESIS AND APPLICATION OF NEOISOPULEGOL-BASED 1,2-AMINOALCOHOLS WITH OCTAHYDROBENZOFURAN CORE

BAMOU Fatima Zahra

Institute of Pharmaceutical Chemistry, University of Szeged, 6720, Szeged, Eötvös u. 6.

1,2-Aminoalcohols have been demonstrated to be excellent chiral auxiliaries and chiral catalysts [1], including aldol reaction [2], addition of organozincs to aldehydes [3], reduction of ketones to alcohols [4] in asymmetric syntheses.

In the present work we set out to create a neoisopulegol-type 1,2-aminoalcohols with octahydrobenzofuran core library and apply the resulting 1,2-aminoalcohol derivatives as chiral catalysts in the enantioselective addition of diethylzinc to benzaldehyde.

The key intermediate *exo*-methylene-substituted perhydrobenzofurane derivative was obtained from (+)-neoisopulegol [5], which was prepared from (-)-isopulegol [6]. Epoxidation of the double bond followed by aminolysis of the resulting epoxide with primary amines produced 1,2-aminoalcohols. The treatment of aminoalcohols with formaldehyde resulted in the formation of spirooxazolidines. The syn-selective dihydroxylation of the key-intermediate produced bicyclic, terpenoid-type diol.

The antimicrobial activity of the prepared compounds was evaluated on multiple bacterial and fungal strains.

The stereochemistry of the resulting compounds was determined by 2D-NMR techniques (COSY, NOESY, HSQC and HMBC).

[1] D. J. Ager, I. Prakash, D. R. Schaad, *Chemical Reviews*, **1996** (96) 835-876.

[2] T. Kano, R. Sakamoto, *Organic Letters*, **2014** (16) 944-947.

[3] M. Fontes, X. Verdager, L. Solà, A. Vidal-Ferran, K.S. Reddy, A. Riera, M.A. Pericàs, *Organic Letters*, **2002** (4) 2381-2383.

[4] V. Stepanenko, M. D. Jesús, W. Correa, I. Guzmán, C. Vázquez, W. de la Cruz, M. Ortiz-Marciales, C. L. Barnes, *Tetrahedron Letters*, **2007** (48) 5799-5802.

[5] D. Friedrich, F. Bohlmann, *Tetrahedron* **1988** (44) 1369-1392.

[6] W. Engel, J. Agric, *Food Chemistry*, **2003** (51) 6589-6597.

PHOTOCATALYTIC HYDROGEN PRODUCTION ON MODIFIED CdS-ZnS SEMICONDUCTORS

Maali-Amel Mersel, Lajos Fodor, Ottó Horváth

*Department of General and Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, University of Pannonia,
H-8200 Veszprém, Egyetem u. 10.*

Photocatalytic hydrogen production from H₂S offers sustainable energy production and abatement of environmental pollution. It could represent an interesting alternative to the Claus process, besides; photocatalytic splitting of H₂S is energetically more favorable than that of water [1].

Sulfide-based materials, as semiconductor photocatalysts, are regarded as good candidates for hydrogen evolution, due to their excellent solar spectrum responses and high photocatalytic activity [2]. In our research, we focused on the use of CdS-ZnS composite because of its controllable band gap width and excellent performance for hydrogen evolution under visible light irradiation. We mainly investigated how various modifications on this type of photocatalysts affected their hydrogen production activity [3].

First, we synthesized CdS-ZnS (1:3) composite with an enhanced photocatalytic activity for hydrogen production, then studied the effects of its modification on the surface with PdS (0.1 %), platinum (0.1%) and/or NiS (0.1% to 1%). It was found that PdS and Pt as co-catalysts didn't remarkably influence the photocatalytic activity. The modification of the catalyst with NiS on the surface and in the bulk was also investigated. Subsequently, the reusability of our different photocatalysts was examined to see their economic profitability. SEM and EDS analyses were also made to reveal the structure of the most efficient photocatalyst (0.5% Ni in the bulk).

[1] V. Preethi, S. Kanmani; *Materials Science in Semiconductor Processing*, **2013** (16) 561-575.

[2] K. Zhang, L. Guo; *Catalysis Science & Technology*, **2013** (3) 1672-1690.

[3] L. Fodor, B. Solymosi, O. Horváth; *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, **2019** (19) 509-515.

Acknowledgement: This work was supported by the Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00016 and the EFOP-3.6.1-16-2016-00015.

POLYMERIZATION REACTIONS INSIDE CARBON NANOTUBES FROM CORONENE AND TETRATHIOTETRACENE MOLECULES FOR GRAPHENE NANORIBBON FORMATION

Ana Cadena^a, Bea Botka^a, Pekker Áron^a, Edit Székely^b, Katalin Kamarás^a

^a *Institute of Solid State Physics and Optics, Wigner Research Centre for Physics, P.O. Box 49, 1525 Budapest, Hungary*

^b *Department of Chemical and Environmental Process Engineering, Budapest University of Technology and Economics, Budafoki út 8, 1111 Budapest, Hungary*

Graphene nanoribbons are attractive as 1D materials, where their bandgap varies with their width. This makes it possible to manipulate their electronic structure and optical response, finding their application in nanoelectronics [1].

Single-walled carbon nanotubes (SWCNT) have been used as containers for molecules where reactions, such as polymerization, were performed by annealing. Here, the nanotube role is to limit the width of the product (linear polymer chains have been observed [2,3]); otherwise, the same reaction outside the nanotube would produce branched products. The length of the formed polymer can be controlled as well as its width, by carrying out the polymerization, at different annealing temperatures [1,4].

We encapsulated coronene and tetrathiotetracene (TTT) molecules in the interior of SWCNT, by supercritical carbon dioxide (scCO₂). For removing the precursor molecules from the exterior of the nanotubes, we washed the samples and controlled the precursor signal with absorption spectroscopy. Then, we annealed the samples from 450°C to 900°C with an increment of 50 and 100°C. Short and long graphene nanoribbons could be detected [1] by resonant Raman spectroscopy using different lasers (1.57, 1.95 and 2.33 eV).

- [1] H. E. Lim, M. Fujihara, S. Okada, Z. Liu, K. Sato, H. Shinohara; *ACS nano*, **2015** (9) 5034-5040.
- [2] A. I. Chernov, P. V. Fedotov, A. V. Talyzin, I. Suarez Lopez, I. V. Anoshkin, A. G Nasibulin; *ACS nano*, **2013**(7): 6346-6353.
- [3] A. Chuvilin, E. Bichoutskaia, M. C. Gimenez-Lopez, T. W. Chamberlain, G. A. Rance, N. Kuganathan, A. N. Khlobystov; *Nature Materials*, **2011** (10): 687.
- [4] B. Botka, M.E. Füstös, H.M. Tóháti, K. Németh, G. Klupp, Zs. Szekrényes, D. Kocsis, M. Utczás, E. Székely, T. Váczi, G. Tarczay, R. Hackl, T.W. Chamberlain, A.N. Khlobystov, K. Kamarás: *Small*, **2014** (10): 1369

Research supported by Hungarian National Research Fund (OTKA) Grant No. SNN 118012, and Stipendium Hungaricum Scholarship Programme. The authors acknowledge Márton Kőrösi for his assistance during the nanotubes filling and Kovacs Eva for her advice.

SZERVES KÉMIAI SZEKCIÓ II.

SZEKUNDER FOSZFINOXID EGYSÉGET TARTLAMAZÓ, 18-KORONA-6-ÉTEREK ELŐÁLLÍTÁSA

Márton Anna^a, Szabó-Szentjóni Hajnalka^a, Tóth Tünde^{a,b}, Huszthy Péter^a

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

^bEnergiatudományi Kutatóközpont, 1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33.

Napjainkban a vegyiparban végzett reakciók jelentős részét megfelelő katalizátorok alkalmazásával végzik. Homogén katalitikus reakciók katalizátor-prekursoraként gyakran használnak trivalens foszforvegyületeket, ami ezen vegyületek rendkívül jó komplexképző tulajdonságán alapul. A trivalens foszforvegyületek nagy hátránya, hogy könnyen oxidálódnak, ezért az előállításuk, illetve felhasználásuk során mindvégig inert körülmények alkalmazása szükséges. A problémára megoldást jelenthet a szekunder foszfinoxid katalizátor-prekursorok alkalmazása, melyre a kutatók nemrégiben figyeltek fel. Ezen vegyületek kiváló komplexképző tulajdonságát már számos reakcióban igyekeztek kihasználni úgy mint, cikloaddíciós reakciókban, hidrogénezés során, cikloizomerizációs reakciókban, illetve hidroformilezési reakciók során is [1]. A kutatók egyes esetekben a hagyományos PPh_3 komplexhez viszonyítva aktívabb komplexek képződését figyelték meg ezen katalizátor-prekursorok alkalmazása során [2].

Kutatómunkám során a szakirodalomban eddig még nem közölt szekunder foszfinoxid egységet tartalmazó királis koronaéterek szintézisével foglalkoztam. Az ilyen típusú vegyületek kiemelkedő komplexképzési tulajdonságokkal rendelkezhetnek, előállításuk során könnyen kialakítható kiralitáscentrum a gyűrűben, így kifejezetten alkalmasak lehetnek katalizátor-prekursoraként való alkalmazásra enantioszelektív reakciókban.

A jövőben az új enantiomertiszta koronavegyületek hidroformilezési reakciókban katalizátor preligandumként való alkalmazásának vizsgálatát tervezzük.

[1] T. Achard; *Chimia*, **2016** (70) 8-19.

[2] A. Christiansen, C. Li, M. Garland, D. Selent, R. Ludwig, R. Franke, A. Börner; *ChemCatChem*, **2010** (2) 1278-1285.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.



IZOINDOLINON-FOSZFONÁTOK ÉS IZOINDOLINON-FOSZFIN-OXIDOK SZINTÉZISÉNEK TANULMÁNYOZÁSA

Rávai Bettina, Tóth Nóra, Tajti Ádám, Bálint Erika

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

Kutatómunkám során célul tűztük ki (3-oxo-2,3-dihidro-1*H*-izoindol-1-il)foszfonátok és -foszfin-oxidok előállítását a 2-formilbenzoesav, primer aminok és különféle foszfor-reagensek (dialkylfoszfitok, etil-fenil-*H*-foszfinát vagy szekunder foszfin-oxidok) Kabachnik–Fields-reakcióját követő intramolekuláris gyűrűzárásával. A környezetbarát szemléletmódnak megfelelően, a kondenzációkat mikrohullámú (MW) besugárzás hatására, katalizátor és – lehetőség szerint – oldószer nélkül kívántuk megvalósítani [1].

Első lépésben a 2-formilbenzoesav, butilamin és dietil-foszfit modellreakciót tanulmányoztuk. A reakció paramétereinek (a reagensek molaránya, a hőmérséklet, illetve a reakcióidő) változtatásával kerestük az optimális körülményeket. Ezt követően a kondenzációt további aminokra és >P(O)H reagensekre terjesztettük ki. A reakciókat gázkromatográfiás (GC) mérésekkel, illetve ³¹P NMR spektroszkópiával követtük. A termékeket oszlopkromatográfia segítségével tisztítottuk, szerkezetüket ³¹P, ¹H és ¹³C NMR spektroszkópiával, illetve nagyfelbontású tömegspektrometriás (HRMS) vizsgálatokkal igazoltuk. Munkám során összesen 25 származékot szintetizáltunk, melyek közül 22 új vegyület.

Tanulmányoztuk továbbá az előállított izoindolinon-foszfin-oxidok deoxigénezését, majd a kapott foszfinok különféle átmenetifémekkel (pl. Pt, Pd) történő komplexképzési reakcióit is vizsgáltuk.

[1] G. Keglevich, E. Bálint; *Molecules*, **2012** (17) 12821-12835.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NKFIH FK123961 pályázat részfinanszírozásával, a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00278/17/7), valamint az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-1-I-BME-165 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

BODIPY- ÖSZTRADIOL KONJUGÁTUMOK SZINTÉZISE

Szabó Vivien^a, Rigó Réka^b, Özvegy-Laczka Csilla^b, Mernyák Erzsébet^a

^aSZTE TTK Szerves Kémiai Tanszék, Szteroidkémiai Kutatócsoport, Magyarország, 6720 Szeged, Dóm tér 8.

^bMTA TTK Enzimológiai Intézet, Membrán Fehérje Kutatócsoport, Magyarország, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

A modern gyógyszerkutatás elsődleges céljai közé tartozik a zöld kémia elveinek figyelembe vételével kifejlesztett, környezetbarát biokémiai eljárások alkalmazása. Napjainkban egyre inkább előtérbe kerülnek a fluoreszcensen jelölt vegyületek alkalmazásán alapuló módszerek. Az ösztron-alapú biokémiai vizsgálatok általában környezetre ártalmatlan radioizotópokat alkalmaznak. A szakirodalomban csupán néhány fluoreszcensen jelölt ösztron származék ismeretes. Ennek oka lehet, hogy a biomolekula kémiai módosítása gyakran a biológiai hatás megváltozásához vezet. A biológiai viselkedés szempontjából meghatározó a konjugálás helyének, az összekapcsoló elem minőségének és a két molekuláris részlet közötti távolságot kar (linker) hosszának megválasztása. Kutatásunk alapvegyületének a 17 β -ösztradiolt (E2) mint a legaktívabb női hormont választottuk. Amennyiben sikerül olyan fluoreszcensen jelölt E2-származékot előállítanunk, amely adott biológiai vizsgálatokban ösztradiolként viselkedik, a konjugátum alkalmas lehet diagnosztikai képalkotó eljárások vagy fluoreszcencia mérésen alapuló molekuláris biológiai vizsgálati módszerek kifejlesztéséhez. A jelöléshez BODIPY-alapú fluoreszcens festéket választottunk [1], mert fiziológiai körülmények között stabil, valamint szintézise és funkcionálizálása számos lehetőséget kínál. A konjugációt a szteroid 3-as fenolos hidroxilcsoportján valósítottuk meg, különböző hosszúságú linkerek beépítésével, kulcslépésként Cu(I)-katalizált azid-alkin cikloaddíciót (CuAAC) [2] vagy Sonogashira kapcsolást [3] alkalmazva. A fluoreszcens festéket terminális alkinként alkalmaztuk. Munkánk során 6 új, linkerrel keresztül konjugált ösztradiol-BODIPY származékot állítottunk elő.

[1] I. Bacsá, Cs. Konc, A. B. Orosz, G. Kecskeméti, R. Rigó, Cs. Özvegy-Laczka, E. Mernyák, *Molecules* **2018** (23) 821.

[2] E. J. Moses, A. D. Moorhouse, *Chemical Society Reviews* **2007** (36) 1249.

[3] R. Chinchilla, C. Nájera, *Chemical Society Reviews* **2011** (40) 5084-5121.

Köszönjük a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (OTKA SNN 124329) támogatását.

DITERPÉNVÁZAS KIRÁLIS AMINODIOLOK SZTEREOSZELEKTÍV ELŐÁLLÍTÁSA ÉS ALKALMAZÁSA KIRÁLIS KATALIZÁTORKÉNT

Ozsvár Dániel

Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Gyógyszerkémiai Intézet, 6720 Szeged, Eötvös u. 6.
E-mail: daniel.ozsvar@pharm.u-szeged.hu

Az elmúlt évtizedben az aminodioloikat és heterociklusos származékaikat részletesen vizsgálták, és számos vegyület bizonyult kiváló katalizátornak sztereoselektív átalakításokban. [1-3] Munkánk során egy természetes sztevizol-glikozidból a sztevozoidból kiindulva készítettük el az aglikon szteviolt, mint kulcsintermediert. [4] A szteviolból diazometán reagenssel a metil-észter származékhoz, majd a kettőskötés vanadil-acetilacetonát katalizátor jelenlétében *terc*-butilperoxiddal végrehajtott sztereoselektív epoxidálásával a megfelelő *cisz*-epoxi-alkoholhoz jutottunk. Oxidáló ágensként dimetil-dioxiránt alkalmazva a *cisz*-epoxi-alkohol mellett 33%-os arányban a *transz*-epoxi-alkoholt is tudtuk izolálni (*cisz:transz* = 2:1). Következő lépésben az epoxid gyűrű *primer* és *szekunder* aminokkal végrehajtott aminolízisével aminodiol könyvtárat állítottunk elő.

Az oxirán gyűrű nátrium-aziddal történő reakciójával azidodiol származékhoz jutottunk, melyből „click” reakcióval triazol típusú vegyületkönyvtárat hoztunk létre.

Az aminodioloik formaldehiddel történő gyűrűzárási reakciója során nagyfokú regioszelektivitást tapasztaltunk.

Az *N*-propargil funkcionizált aminodiolból egy alternatív reakcióúton fordított „click” termékhez jutottunk. Néhány aminodiol és „click” termék ígéretes citotoxikus aktivitást mutatott. Ezenfelül vizsgáltuk az előállított amidodiol származékok katalitikus aktivitását benzaldehid és dietil-cink modellreakciójában.

- [1] M. S. I. El Alami, M. A. El Amrani, F. Agbossou-Niedercorn, I. Suisse, A. Mortreux, *Chem. Eur. J.* **2015** (21) 1398
[2] Z. Szakonyi, Á. Csőr, A. Csámpai, F. Fülöp, *Chem. Eur. J.*, **2016** (22) 7163.
[3] T. M. Le, A. Csámpai, F. Fülöp, Z. Szakonyi, *Chem. Eur. J.* **2018** (24) 13607.
[4] A. Ullah, S. Munir, Y. Mabkhot, S.L. Badshah, *Molecules* **2019** (24) 678.

SZILÁRD HORDOZÓHOZ RÖGZÍTETT HETEROPOLISAVAK: NAGY HATÉKONYSÁGÚ KATALIZÁTOROK ALKIL-AROMÁS VEGYÜLETEK ELŐÁLLÍTÁSÁRA

Császár Zsófia, Bakos József, Farkas Gergely

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

A Keggin-szerkezetű heteropolisavak (HPA) számos kedvező tulajdonsága vonzóvá teszi savkatalizált reakciókban való alkalmazásukat homogén- és heterogén-katalitikus reakciókban egyaránt. Ezen vegyületek felhasználásával kiválthatók a kedvezőtlen tulajdonságokkal rendelkező, erősen korrozív katalizátorok, mint a kénsav, az $AlCl_3$ vagy a $FeCl_3$. Továbbá a heteropolisavak szilárd hordozóra történő rögzítése környezetbarát felhasználást tesz lehetővé, ennek köszönhetően az utóbbi évtizedekben elterjedt e katalizátorok alkalmazása aromás vegyületek Friedel-Crafts alkilezési reakcióiban [1, 2].

Munkánk során foszfor-volfrámsavat (PTA) tartalmazó heterogén katalizátorokat állítottunk elő az egyes hordozók minőségének, illetve a rögzített heteropolisav mennyiségének változtatásával. A katalizátorokat aromás szénhidrogének Friedel-Crafts alkilezési reakciójában teszteltük. Vizsgálataink során összehasonlítottuk a különböző szilárd hordozókra rögzített, azonos PTA-tartalmú kompozitok katalitikus tulajdonságait, továbbá az azonos hordozóhoz kötött, eltérő mennyiségű foszfor-volfrámsavat tartalmazó katalizátorok aktivitását.

A kutatás során előállított katalizátorok nagy stabilitása és rendkívüli aktivitása lehetőséget biztosít folyamatos áramlásos kísérleti reaktorban való alkalmazásukra. Ezen kísérletekhez egy folyamatos üzemű mikroreaktort állítottunk össze, mellyel toluol és 1-oktén Friedel-Crafts alkilezési reakcióját vizsgáltuk különböző körülmények között. Az alkalmazott katalizátor igen hatékonyan bizonyult a folyamatos üzemű reaktorban való alkalmazás során.

[1] Y. Ren, B. Yue, M. Gu, H. He; *Materials*, **2010** (3) 764-785.

[2] M. J. da Silva, C. M. de Oliveira; *Current Catalysis*, **2018** (7) 26-34.

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



LOMBIKBÓL ÁRAMLÁSOS REAKTORBA: A TECHNOLÓGIA VÁLTÁSÁNAK LEHETŐSÉGEI A VORTIOXETIN SZINTÉZISÉNEK PÉLDÁJÁN KERESZTÜL

Boros Zoltán^{a,c}, Nagy-Győr László^a, Kátai-Fadgyas Katalin^b, Kóhegyi Imre^b, Ling István^b, Nagy Tamás^b, Iványi Zoltán^b, Oláh Márk^b, Ruzsics György^b, Temesi Ottó^a, Volk Balázs^b

^a H-ION Kutató, Fejlesztő és Innovációs Kft., 1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.

^b Egis Gyógyszergyár Zrt., 1106 Budapest, Keresztúri út 30-38.

^c SynBiocat Kft., 1172 Budapest, Szilasliget utca 3.

Munkánk során a vortioxetin szintézis piperazin képzési lépését vizsgáltuk folyamatos üzemű, áramlásos körülmények között [1]. A reakció laboratóriumi léptékű, szakaszos üzemen, kidolgozott eljárásban 130-135°C között hosszú reakció idővel (27 óra) játszódik le, azonban hosszas optimalizálás után is jelentős mértékű melléktermék képződés volt megfigyelhető, így tisztítási eljárások kidolgozása is szükségesszerűnek bizonyult. A szakaszos üzemű reakció méretnövelésének kísérleteiben még a reakció idő további növelésével (36 óra) sem lehetett elérni a teljes konverziót.

A folyamatos üzemű áramlásos kémiai kísérleteket a kimondottan erre a célra fejlesztett új reaktorrendszerben hajtottuk végre. Széleskörűen vizsgáltuk a reakció paramétereit (oldószer arány, reagensek koncentrációja és moláris aránya, tekercselt loop reaktor geometriája, tartózkodási idő, hőmérséklet), valamint a méretnövelés megvalósíthatóságának lehetőségeit is.

A kísérleti munkánk második felében a sikeresen méretnövelt folyamat finomhangolását szisztematikus kísérlettervezés segítségével tanulmányoztuk. Végül 30 perc tartózkodási mellett 190 °C-on végzett reakció bizonyult a leghatásosabb eljárásnak, ezzel a módszerrel folyamatos üzemű, áramlásos kémiai körülmények között magas termeléssel és tisztasággal állítható a vortioxetin hatóanyag.

[1] Z. Boros, L. Nagy-Győr, K. Kátai-Fadgyas, I. Kóhegyi, I. Ling, T. Nagy, Z. Iványi, M. Oláh, Gy. Ruzsics, O. Temesi, B. Volk, *J. Flow Chem.*, **2019** (9) 101-113.

FOSZFABENZOLOK AROMÁSSÁGÁNAK ÉS STABILITÁSÁNAK VIZSGÁLATA

Mikeházi Antal János^a, Nyulászi László^a, Buzsáki Dániel^a

^aBudapesti Műszaki és gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szervetlen és Analitikai Kémia tanszék

A Li-Mg, Be-Al és B-Si elem párokra vonatkozó már régen megfogalmazott diagonál szabálynak P-C elem pár rokonságára vonatkozó kiterjesztését csak nemrégiben fogalmazták meg. Ez a hasonlóság leginkább a C=P kettőskötést tartalmazó rendszerekben érhető tetten [1]. Így az aromáság etalonjaként számontartott benzol egy CH egységét foszforra cserélve a foszfabenzolhoz jutunk, melynek aromásága a benzoléval összemérhető. Amíg a foszfabenzol kémiáját viszonylag részletesen tanulmányozták, a két, illetve három foszfort tartalmazó difoszfá- és trifoszfabenzolokkal sokkal kevesebbet foglalkoztak, előállítani e vegyületek közül csak keveset sikerült. Ugyanakkor elméleti számításokat végeztek ezekre a rendszerekre, vizsgálva stabilitásukat, aromás sajátságait. E munkák végkövetkeztetései között több eltérés mutatkozott. Így a jelen dolgozatban egy átfogó elméleti kémiai módszerekkel történő vizsgálatot végeztem el, melynek során tanulmányoztam a gyakorlati szempontból érdekes mono- di- és trifoszfabenzolokat, melyek közül kiemelten érdekes az 1,4-difoszfabenzol, melynek szintézisére nemrégiben egy jól általánosítható eljárást dolgoztak ki [2].

Az aromáságra jellemző különböző mutatók (geometriai: Bird-index, BDSHRT mérőszám, mágneses: NICS, szuszceptibilitás-növekmény, és energetikai: különböző homodezmozotikus reakciók) részletes vizsgálatával megállapítottam, hogy az aromáság mértéke a többszöri foszfor helyettesítés hatására is csak kis mértékben csökken, ugyanakkor a foszforatomok növekvő számával a sík, hattagú gyűrűben a feszültség növekszik, s ezzel a rendszer stabilitása csökken. A változatlan aromáság jól értelmezhető azzal, hogy a CH-foszfor csere hatására a betöltött π -pályák energiája alig változik, s hasonló megállapítás tehető a gyökkationok stabilitására is. Ugyanakkor a szénatomokat fokozatosan cserélve foszforatomokra a betöltetlen pályák minden egyes cserénél jelentősen stabilizálódnak és ezzel együtt az elektronaffinitás is növekszik a foszforatomok számának növekedésével. Mindennek következménye a nukleofilekkel való fokozott reakciókészség.

A reakciókészség szempontjából legizgalmasabb kérdés a hidrogén aktiválása, melynek lehetőségét az 1,3,5-trifoszfabenzol esetében kísérletileg tapasztalt irreverzibilis reakcióval igazolták. A jelen dolgozatban azt tanulmányozom, hogy lehetséges-e ezen reakciót reverzibilisen véghez vinni esetleg más foszfabenzolok esetén is.

[1] K. B. Dillon, F. Mathey, J. F. Nixon; Phosphorus: The Carbon Copy. Wiley, **1998**

[2] A. Koner, G. Pfeifer, Z. Kelemen, G. Schnakenburg, L. Nyulászi, T. Sasamori and R. Streubel, Angew. Chem., Int. Ed., **2017** (56) 9231 - 9235.

ELEKROFIL FUNKCIÓS CSOPORTOK ÉS TIOL-MODELLVEGYÜLETEK REAKCIÓJA

**Varga Petra Regina^a, Petri László^a, Imre Tímea^b, Ábrányi-Balogh Péter^a, Keserő György
Miklós^a**

^aTTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport: 1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.

^bTTK MS Metabolomika Kutatócsoport: 1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.

Az elmúlt évtizedekben folytatott sikeres kutatások eredményeinek köszönhetően napjainkban fokozott érdeklődés kíséri a hatásukat kovalens fehérjemódosításon alapuló mechanizmussal kifejtő gyógyszerjelöltek fejlesztését [1]. E fejlesztések során fontos a megfelelő elektrofil kötőelemek kiválasztása, melyhez elengedhetetlen – cisztein aminosav, mint célpont esetén – azok tiol-reaktivitásának jellemzése, amelyet kismolekulás tiol-modellvegyületekkel végzett kinetikai vizsgálatok útján tehetünk meg [2]. Kutatásunk során néhány széles körben alkalmazott modell esetében egy 14 tagú elektrofil fragmenskönyvtár felhasználásával igyekeztünk feltérképezni a különböző tiol-modellvek reaktivitási profilját, HPLC-alapú kinetikai mérések segítségével [3]. Az egyes próbavegyületek különböző modellekben mutatott reakciójában keletkező termékeket HPLC-MS és HPLC-MS/MS mérésekkel azonosítottuk. Megállapítottuk, hogy sok esetben számottevő különbség van egyes tiol-modellvek reaktivitásában, ezért ezek kiválasztása is jelentősen befolyásolhatja reaktivitási szűrések eredményességét. Ez végső soron potenciálisan aktív kötőelemek kizárásával, ezáltal hatékony kovalens inhibitor molekulák fejlesztésére alkalmas kiindulópontok figyelmen kívül hagyásával járhat. Méréseink alapján az irodalomban is leggyakrabban alkalmazott GSH (*L*-glutathion) bizonyult a legjobban használható tiol funkciót tartalmazó modellnek.

[1] J. Singh, P. R. Petter, T. A. Baillie, A. Whitty: *Nature Reviews: Drug Discovery*, **2011** (10) 307-317.

[2] R. M. LoPachin, T. Gavin: *Free Radical Research*, **2016** (2) 195-205.

[3] P. Ábrányi-Balogh, L. Petri, T. Imre, P. Szíjj, A. Scarpino, M. Hrast, A. Mitrovic, U. P. Fonovic, K. Németh, H. Barreteau, D. I. Roper, K. Horváti, Gy. G. Ferenczy, J. Kos, J. Ilas, S. Gobec, Gy. M. Keserő: *European Journal of Medicinal Chemistry*, **2018** 94-107.

Köszönjük az NKFIH PD124598 pályázat anyagi támogatását!

ÚJ BIOMIMETIKUS KATALIZÁTOR CSALÁD KIFEJLESZTÉSE GYÓGYSZERMETABOLITOK SZINTÉZISÉRE

**Krammer Réka Melinda^a, Decsi Balázs^a, Poppe László^a
Balogh György Tibor^{b,c}, Balogh-Weiser Diána^{a,d}**

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

^b Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

^c Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerhatástani és Biofarmáciai Intézet, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.

^d Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út. 8.

A gyógyszerkutatás során kiemelkedő jelentőségű a potenciális hatóanyagok metabolizmushoz kapcsolódó folyamatainak vizsgálata, hiszen azok nagymértékben befolyásolják a farmakológiai hatást, toxicitást. Hagyományosan a preklinikai metabolit vizsgálatokat *in vitro* májsejteken végzik, ahol a metabolitok alacsony koncentrációban, biológiai mátrix mellett keletkeznek. Ezek kiküszöbölésére jelenthetnek megoldást az *in vitro* biomimetikus (élő szervezet folyamatait utánzó) módszerek [1]. A szervezet egyik fő, gyógyszermetabolizmusért felelős enzimrendszere a citokróm P450 izoenzim család, amely működését szintetikus metalloporfirinek segítségével is helyettesíthetjük [2].

Kutatómunkánk egy jól szabályozható és reprodukálható metalloporfirin alapú katalizátor rendszer kifejlesztésére irányul. A hordozórendszer kialakításához mezopórusos szilika részecskék felületmódosítását hajtottuk végre primer aminocsoportot tartalmazó, eltérő hosszúságú és mozgékonyoságú linkerek segítségével, amelyek ionos kötőhelyeket biztosítanak a *mezo*-tetra(4-szulfoniloxifenil) vasporfirin számára, amelyek várhatóan befolyásolják a rendszer katalitikus működését. Az oldott fázisú porfirin, valamint a fejlesztett katalizátor családok hatékonyságának vizsgálatát Amiodaron hatóanyag biomimetikus oxidációjában vizsgáltuk szakaszos és folyamatos üzemben. Eredményeink megmutatták, hogy a folyamatos áramlású biomimetikus oxidáció alkalmas volt a humán metabolitok azonosítására, valamint új hatóanyag származékok előállítására is.

[1] W. Lohmann, U. Karst, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, **2008** (391) 79-96.

[2] T. Földi, G. Ignácz, B. Decsi, Z. Béni, Gy. I. Túrós, J. Kupai, D. Balogh-Weiser, I. Greiner, P. Huszthy, Gy. T. Balogh, *Chemistry: A European Journal*, **2018** (24) 9385-9392.

A kutatás az Innovációs és Technológiai Minisztérium Tématerületi Kiválósági Program (TKP) – TUDFO/51757/2019-ITM-Hatékonyságnövelt és intelligens gyártástechnológiák - Vegyipari technológiák intenzifikálása Program és ÚNKP-19-2-I kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Program támogatásával készült.

ELEMI KÉN ALKALMAZÁSA MULTIKOMPONENSŰ REAKCIÓKBAN

Szabó Renáta^{a,b}, Németh András György^{a,b}, Dr. Ábrányi-Balogh Péter^{a,b}

^aTermészettudományi Kutatóközpont, Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, 1117 Budapest Magyar Tudósok körútja 2.

^bBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, 1111 Budapest Műegyetem rakpart 3.

A multikomponensű reakciók fontos részét képezik a modern szerves szintetikus kémia eszköztárának. Segítségükkel komplex szerkezetek állíthatók elő akár egy preparatív lépésben, illetve alkalmasak lehetnek környezetbarát, atomhatékony és biztonságos alternatívát nyújtani, mint a korábban kidolgozott szintetikus eljárások. A természetben nagy mennyiségben előforduló, nem toxikus és könnyen kezelhető elemi kén szerves szintézisekben való felhasználása pedig segít kiváltani veszélyes, mérgező reagenseket, illetve fokozni a reakciók atomhatékonyosságát [1-2].

Munkánk során elemi kénből szerves bázisok segítségével poliszulfid anionokat tartalmazó homogén vizes oldatot állítottunk elő. Ezt az oldatot reagensként alkalmaztuk egy új multikomponensű reakcióban laktám-gyűrűt tartalmazó tiokarbamidok előállítására izonitrilekből és amidin típusú bázisokból kiindulva.

Az oldatfázisban aktivált kén előnye, hogy azzal a reakció víz-acetonitril elegyben homogén körülmények között is megvalósítható, így az eljárást sikeresen átültettük áramlásos kémiai reaktorba is. A kidolgozott módszert változatos szerkezetű izonitrilekre és amidin típusú bázisokra is kiterjesztettük, ezzel megmutatva az eljárás széleskörű alkalmazhatóságát.

[1] T. B. Nguyen, L. Ermolenko, A. Al-Mourabit; *Organic Letters*, **2012** (14) 4274–4277.

[2] T. B. Nguyen; *Advanced Synthesis and Catalysis*, **2017** (359) 1066–1130.

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőimnek a rengeteg hasznos tanácsért, illetve segítségért, melyet számomra nyújtottak.

SZERVES KÉMIAI SZEKCIÓ I.

IZOTIOCIANÁT ALAPÚ CISZTEIN-SZELEKTÍV FLUORESZCENS ANTITEST JELÖLÉS

**Petri László^a, Szijj Péter^b, Kelemen Ádám^a, Imre Tímea^c, Gömörly Ágnes^d, Hegedűs Krisztina^e,
Ábrányi-Balogh Péter^a, Chudasama Vijay^b és Keserű György Miklós^a**

^aTTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport: 1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.

^bDepartment of Chemistry, University College London: 20 Gordon Street, London WC1H 0AJ, UK

^cTTK MS Metabolomika Kutatócsoport: 1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.

^dTTK MS Proteomika Kutatócsoport: 1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.

^eELTE Immunológia Tanszék: 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/C.

Napjainkban a kovalens inhibitorok fejlesztésétől a kémiai biológiai vizsgálatokig széles körben elterjedt a fehérjékhez kovalensen kötődni képes vegyületek alkalmazása [1]. A kiválasztott fehérjék fluoreszcens molekulákkal végzett specifikus jelölése gyakori és fontos feladata a diagnosztikai kutatásoknak is [2-3]. Az ehhez használható vegyületeket funkcionálisan két fontos egységre oszthatjuk: a fluoreszcenciáért felelős magszerkezetre és a fehérjéhez történő kötődésért felelős reaktív kötőelemre.

Munkánk során új szerkezeti egységként benzil-izotiocianát kötőelemmel ellátott fluoreszcens jelölővegyületet állítottunk elő, vizsgáltuk ezek reaktivitását és specificitását, majd specifikus antitest-jelölést valósítottunk meg. Megvizsgáltunk két izotiocianát kötőfejjel ellátott kovalens fragmens, a benzil-izotiocianát és a fenil-izotiocianát tiol-reaktivitásának és aminosav-szelektivitásának pH-függését, továbbá különböző fehérjecélpontokon történő kötődési aktivitásukat. Ezután előállítottuk a fluoreszcein-izotiocianát benzil analógját, majd vizsgáltuk a vegyület spektrofotometriai tulajdonságait. A továbbiakban antitest-fragmentumon és antitestben végzett jelölési kísérletek során megállapítottuk, hogy a benzil-izotiocianát kötőelemmel ellátott fluoreszcein származékkal sikerült cisztein-szelektív, egyszeres, stabil jelölést elérni. Az eredményeink alapján az általunk előállított és széleskörűen vizsgált jelölővegyület az optimált jelölési protokoll felhasználásával hasznos eszköze lehet a kémiai biológia eszköztárának.

[1] M. H. Potashman, M. E. Duggan; *Journal of Medicinal Chemistry*, **2009** (5) 1231-1246.

[2] M. S. T. Goncalves; *Chemical Reviews*, **2009** (1) 190-212.

[3] B. N. G. Giepmans, S. R. Adams, M. H. Ellisman, R. Y. Tsien; *Science*, **2006** (5771) 217-224.

Köszönjük a 2018-1.3.1-VKE-2018-00032 és az NKFIH PD124598 pályázatok anyagi támogatását!

EGY DINAMIKUS REZOLVÁLÁSI ELJÁRÁS ALKALMAZÁSA AMINO-FOSZFÓNIUMSÓ DIASZTEREOMEREK ELŐÁLLÍTÁSÁRA

Fersch Dávid^a, Herbay Réka^a, Keglevich György^a, Bagi Péter^a

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

Kutatócsoportunkban az optikailag aktív foszforvegyületek előállításával már évek óta foglalkozunk [1]. Ezen vegyületcsalád esetében is terjednek a dinamikus rezolválási eljárások, amelyekkel a racém vegyület teljes mennyisége a kívánt enantiomerré alakítható [2]. A közelmúltban megvalósították foszfin-oxidok rezolválását alkoxi-foszfóniumsó intermediereken keresztül, de a módszer hátránya, hogy az alkoxi-foszfóniumsók nem stabilak, így diasztereomerjeik nem izolálhatók és tisztíthatók [3].

A kutatómunka keretein belül egy olyan dinamikus rezolválási eljárás kidolgozását terveztük, ami amino-foszfóniumsó diasztereomerek előállításán alapul. Az amino-foszfóniumsók hővel és nedvességgel szemben stabil vegyületek. Eljárásunk során a racém foszfin-oxidból halogénezőszerezrel állítottunk elő halo-foszfóniumsót, amelynek enantiomerjei a reakció körülményei között egymásba alakulnak át, ami a dinamikus rezolválási eljárás feltétele. Ezt követően, a halo-foszfóniumsót királis aminnal reagáltatva a megfelelő amino-foszfóniumsóhoz jutottunk egy diasztereoszelektív reakcióban.

Munkánk során részletesen vizsgáltuk a különböző halogénezőszerek hatását, illetve a képződő halo-foszfóniumsók reaktivitását. A második reakciólépésben számos királis amint kipróbáltunk, illetve optimalizáltuk a reakciókörülményeket, majd kiterjesztettük a reakciót több foszfin-oxidra. Az előállított amino-foszfóniumsó diasztereomerek jelentőségét az adja, hogy több optikailag aktív *P*-sztereogén centrumot tartalmazó foszforvegyület kiindulási anyagai lehetnek.

- [1] P. Bagi, V. Ujj, M. Czugler, E. Fogassy, G. Keglevich; *Dalton Transactions*, **2016** (45) 1823-1842.
[2] K. Nikitin, K. V. Rajendran, H. Müller-Bunz, D. Gilheany; *Angewandte Chemie - International Edition*, **2014** (53) 1906-1909.
[3] (a) E. V. Jennings, K. Nikitin, Y. Ortin, D. Gilheany; *Journal of the American Chemical Society*, **2014** (136) 16217-16226. (b) K. Nikitin, H. Müller-Bunz, J. Muldoon, D. Gilheany; *Chemistry: A European Journal*, **2017** (23) 4794-4802.

A szerzők köszönik a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatását (OTKA PD 116096).

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült (ÚNKP-19-2-I-BME-379).

P-SZTEREOGÉN CENTRUMOT TARTALMAZÓ ACIKLUSOS FOSZFIN-OXIDOK ALKALMAZÁSA ENANTIOSZELEKTÍV KATALITIKUS WITTIG-REAKCIÓBAN

Péczka Nikolett^a, Herbay Réka^a, Bagi Péter^a

^a*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.*

A Wittig-reakció mai napig az egyik leggyakrabban alkalmazott módszer szén-szén kettős kötés kialakítására. Azonban a módszer hátránya, hogy sztöchiometrikus mennyiségben szükséges hozzá a megfelelő foszfin. Az elmúlt években O'Brien és munkatársai valósítottak meg először katalitikus Wittig-reakciót, melyhez a gyűrűs foszfin-oxidok jó prekatalizátornak bizonyultak [1-2].

Az irodalomban csak néhány példa található a Wittig-reakció enantioszelektív változatára, amely reakciók a megfelelő prokirális vegyületekből optikailag aktív foszforvegyületet alkalmazva valósíthatók meg [3]. Azonban ezekhez a reakciókhoz is sztöchiometrikus mennyiség kell a nagyértékű királis foszfinból, így ebben az esetben előnyös lehet egy katalitikus eljárás. Az enantioszelektív katalitikus Wittig-reakció kidolgozása Werner és kutatócsoportjához köthető. Eljárásuk során jellemzően királis vázat tartalmazó foszfinokkal vagy foszfin-oxidokkal valósították meg a reakciót [4].

Munkánk során azt a célt tűztük ki, hogy foszfor-sztereogén centrumot tartalmazó gyűrűs és aciklusos vegyületek alkalmazhatóságát teszteljük enantioszelektív katalitikus Wittig-reakcióban. Modellreakciónak a *bisz-nor*-Wieland-Miescher-ke-ton előállítását választottuk, amely reakcióval egy értékes biciklusos vegyület kapható. A katalitikus ciklus több lépésből áll, úgymint a foszfin-oxid deoxigénezése, foszfóniumsó, majd a megfelelő foszfónium-ilid képződése, végül pedig a gyűrűzárás. Munkánk során első célunk volt, hogy a katalitikus ciklus különböző lépéseit külön-külön vizsgáljuk, és optimalizáljuk a reakciókörülményeket mind a konverzió, mind az enantioszelektivitás szempontjából.

- [1] O'Brien, C. J.; Tellez, J. L.; Nixon, Z. S.; Kang, L. J.; Carter, A. L.; Kunkel, S. R.; Przeworski, K. C.; Chass, G. A. *Angew. Chemie - Int. Ed.* **2009**, *48* (37), 6836–6839.
- [2] Coyle, E. E.; Doonan, B. J.; Holohan, A. J.; Walsh, K. A.; Lavigne, F.; Krenske, E. H.; O'Brien, C. *J. Angew. Chemie Int. Ed.* **2014**, *53*, 12907
- [3] Trost, B. M.; Curran, D. P. *Tetrahedron Lett.* **1981**, *22*, 4929.
- [4] Werner, T.; Hoffmann, M.; Deshmukh, S. *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, *2014*, 6630

A szerzők köszönik a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatását (OTKA PD 116096).

ÁLLÓFÁZISHOZ VALÓ KOVALENS RÖGZÍTÉSRE ALKALMAS KORONAÉTER SZELEKTORMOLEKULA HETEROAROMÁS KULCSINTERMEDIEREINEK SZINTÉZISE

Benda Bianka^a, Golcs Ádám^a, Tóth Tünde^{a,b}, Huszthy Péter^a

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

^b*Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest, 1120 Konkoly-Thege Miklós út 29-33.*

Munkám során három piridin egységet tartalmazó, szilikagélhez kovalens kötésekkel rögzíthető koronaéter előállítására, melyhez a kulcsintermediereket sikeresen szintetizáltam. Az előállítani kívánt makrociklus várhatóan alkalmazható szilikagélhez rögzített szelektormolekulaként protonált amin típusú vegyületek rendűség szerinti elválasztását célzó eljárásban.

A gyűrűzárás kulcsintermediere közül a benzilcsoporttal ellátott piridin-diol és ditozilát kutatócsoportunkban már korábban elő lett állítva [1]. A bisz(piridin)-diol az irodalomban már ismert vegyület [2], de más útvonalon állítottuk elő. A bisz(piridin)-ditozilát az irodalomban még nem ismert vegyület, melyet sikerült előállítanom. Kutatómunkám folytatásaként a gyűrűzárási reakciót két útvonalon tervezem megvalósítani. Az egyik útvonalon a bisz(piridin)-diolt fogom reagáltatni a benzilcsoporttal védett ditoziláttal, nátrium-hidriddel *N,N*-dimetilformamidban. A másik reakcióúton a bisz(piridin)-ditozilátból és benzilezett diolból nátrium-hidriddel tetrahidrofuranban tervezem előállítani a célvegyület makrociklust.

A következő lépésben a piridino-koronaétert 3-(trietoxiszilil)propil-jodiddal kálium-karbonát és *N,N*-dimetilformamid jelenlétében tervezem reagáltatni. A trietoxiszilil-csoporttal szubsztituált piridino-koronaétert HPLC minőségű szilikagélhez szeretnénk rögzíteni egy korábban a szakirodalomban sikeresen alkalmazott eljárással [3]. A szelektormolekula szilikagélhez történő rögzítésével kapott állófázist üres rozsdamentes acéloszlopba tervezzük betölteni, hogy megfelelő HPLC oszlopot kapjunk.

[1] Kupai, J.; Rojik, E.; Huszthy, P.; Székely, Gy.; *Journal of the American Chemical Society*, **2015** (18) 9516-9525.

[2] Hiroshi, T., Satoshi, S., Jun'ichi, U., Takao, H., Takahiro, I., Osamu, Y.; *The Journal of Organic Chemistry*, **1998** (63) 3884-3894

[3] Farkas, V.; Tóth, T.; Orosz, G.; Huszthy, P.; Hollósi, M.; *Tetrahedron: Asymmetry* **2006** (17) 1883-1889.

NUKLEOZIDOK TIOLADDÍCIÓS MÓDOSÍTÁSA ÉS A TERMÉKEK BIOLÓGIAI HATÁSVIZSGÁLATA

Bege Miklós^{abc}, Bakai-Bereczki Ilona^a, Borbás Anikó^a

^aDebreceni Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Tanszék, Egyetem tér 1.4032, Debrecen.

^bDebreceni Egyetem, Gyógyszerészeti Tudományok Doktori Iskola, Egyetem tér 1.4032, Debrecen

^cMTA-DE Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport, Egyetem tér 1.4032, Debrecen

A nukleozidok minden élőlény számára nélkülözhetetlen vegyületek, melyek változatos biológiai feladatokat látnak el, így aztán nem meglepő, hogy a nukleozidszármazékokat a gyógyászat különböző területein is fel lehet használni pl. a vírus- vagy tumorellenes kemoterápiában.[1-2]

A célunk új, szénhidrát komponensen módosított nukleozidszármazékok előállítása, melyek potenciálisan biológiailag aktívak lehetnek. Ehhez szintetikus eszköznek a fotoiniciált tioladdíciót választottuk, mely alkalmas nagyszámú új vegyület előállítására.

Mivel a nukleozidok tiol-én reakcióban mutatott viselkedése jelentősen eltér az analóg szénhidrátszármazékokétól, és mivel korábban nukleozidszármazékokon nem hajtottak végre ilyen típusú reakciót, először szükséges volt optimalizálni a reakciókörülményeket, beleértve az iniciálási módszert, az oldószert és hőmérsékletet, ill. a védőcsoportokat. Mindezek után nagyszámú új származékot állítottunk elő különböző tiolok 2', 3' és 4' telítetlen nukleozidokra való addíciójával.

Amellett, hogy tanulmányoztuk a reakciók sztereoselektivitását,[3] az így előállított vegyületek különböző biológiai vizsgálatoknak lettek alávetve, és számos citosztatikus vagy vírusellenes hatást mutató vegyületet találtunk.

[1] J. Shelton, X. Lu, J. A. Hollenbaugh, J. H. Cho, F. Amblard, R. F. Schinazi, *Chemical Reviews*, **2016** (116) 14379-14455

[2] L. P. Jordheim, D. Durantel, F. Zoulim, C. Dumontet, *Nature Reviews Drug Discovery*, **2013** (12) 447-464.

[3] M. Bege, I. Bereczki, M. Herczeg, M. Kicsák, D. Eszenyi, P. Herczegh, A. Borbás, *Organic and Biomolecular Chemistry*, **2017** (15) 9226-9233.

A kutatást a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 projekt támogatta. A projekt az Európai unió támogatásával, az európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. A kutatás az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának Szakmai Támogatásával készült.

NAFTOXAZINON-SZÁRMAZÉKOK EGYEDÉNYES ÉS KÉTLÉPÉSES SZINTÉZISE T3P[®] FELHASZNÁLÁSÁVAL

Varga Valentina^a, Dr. Milen Mátyás^b, Dr. Ábrányi-Balogh Péter^a

^a TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

^b Egis Gyógyszergyár Zrt., 1106 Budapest, Keresztúri út 30-38.

Kutatócsoportunkban évek óta foglalkoznak egy foszfortartalmú ciklikus anhidrid, a T3P[®] reagens alkalmazásával szerves kémiai reakciókban, és sokféle reakciótípusra (Kabachnik-Fields-, Bischler-Napieralski-, Ugi-reakció és Robinson-Gabriel-ciklizáció) dolgoztak ki új, hatékony reakcióutakat a céltermék előállítására érdekében. Az Ugi-reakció során T3P[®] alkalmazásával egy 27 tagú oxoizindolin vegyülettárat hoztunk létre, és megvalósítottuk a (±)-nuevamine egyedényes szintézisét [1]. Tekintettel arra, hogy a T3P[®]-t sikeresen alkalmaztuk multikomponensű reakcióban, jelenlegi kutatómunkánk során a Betti-reakció vizsgálatát és fejlesztését tűztük ki célul. A Betti-reakció egy háromkomponensű kondenzációs reakció egy amin, egy aldehid és egy aromás hidroxivegyület, leggyakrabban 2-naftol között [2]. Kutatómunkánk során kiindulási anyagként 2-naftolt, aromás aldehideket és metil-karbamátot alkalmazva a körülményektől függően T3P[®] reagenssel elősegítve a reakciót kétféle termék, 2-hidroxinaft-1-il-karbamát- és naftoxazinon-származékok keletkezését tapasztaltuk. Munkánk során célul tűztük ki a két származék előállításának optimalizálását, és megvalósítottuk a gyűrűzárt naftoxazinon-származék one-pot szintézisét az 1-karbamatoalkil-2-naftol intermedieren keresztül. A sikeres optimalizálást követően mindkét eljárás hatékonyságát egy 15 tagú vegyülettár előállításával igazoltuk (hetero)aromás aldehidek felhasználásával.

[1] V. Varga, M. Milen, P. Ábrányi-Balogh, *Tetrahedron Letters*, **2018** (59) 3683-3689.

[2] C. Cardellicchio, M. A. M. Capozzi, F. Naso, *Tetrahedron: Asymmetry*, **2010** (21) 507-517.

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Dr. Ábrányi-Balogh Péternek és Dr. Milen Mátyásnak, akik lehetőséget biztosítottak a kutatásomhoz, és hasznos tanácsokkal láttak el munkám során.

ANYAGTUDOMÁNYI SZEKCIÓ I.

KÉMIAILAG MÓDOSÍTOTT KITOZÁNBEVONATOK KORRÓZIÓS VÉDŐHATÁSÁNAK ÉS NEDVESEDÉSI TULAJDONSÁGAINAK TANULMÁNYOZÁSA

Márton Péter^a, Szabó Gabriella Stefánia^b, Albert Emőke^a, Hórvölgyi Zoltán^a

^aBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rkp.3.

^bBabes-Bolyai Tudományegyetem, Strada Universităţii 7-9, Cluj-Napoca 400084, Románia

A természetes eredetű korróziós inhibitorokkal impregnált kitozánalapú, korrózióvédő bevonatok az utóbbi években az érdeklődés középpontjába kerültek [1]. A kitozán biokompatibilitása és biodegradabilitása miatt az ilyen rendszerek megfelelő hatékonyság mellett környezetbarát megoldást kínálnak a mindennapi életben felmerülő korróziós problémákra. Kutatásaim során indigókárminnal impregnált, illetve acilezett kitozánbevonatok korróziós védőhatását tanulmányoztam potenciodynamikus polarizációs mérésekkel, összefüggést keresve az alkalmazott kémiai módosítás és a bevonat korróziós viselkedése közt. A védőhatás növelésének egy további lehetséges módja, ha a bevonat távol tartja a felülettől a korróziót kiváltó tényezőket, elsősorban a nedvességet. A hidrofób tulajdonságú kitozánbevonatok előállítását szililező ágensek segítségével Kurita és társai tanulmányozták részletesebben [2]. Az eljárás során a kitozánt oldatfázisban szililezték, majd a kapott termékből hoztak létre bevonatot, ám a fordított sorrendben történő előállítást (azaz a natív kitozánbevonat utólagos kémiai módosítását) nem vizsgálták, munkám során ezért ebben az irányban végeztem kutatásokat. Az üveg- illetve cinkhordozóra felvitt natív kitozánbevonatokat többféle szililezőszerrel kezeltem gőztérben és oldatfázisban egyaránt, vizsgálva a kezelési időtartam, a használt reagens, a hordozó és az esetlegesen alkalmazott ionos vagy kovalens keresztkapcsoló ágens szerepét.

[1] Á. F. Szőke, G. S. Szabó, Z. Hórvölgyi, E. Albert, L. Gaina, L. M. Muresan; *Carbohydrate Polymers*, **2019** (3) 1-30.

[2] K. Kurita, M. Hirakawa, S. Kikuchi, H. Yamanaka, J. Yang; *Carbohydrate Polymers*, **2004** (56) 333-337.

ELTÉRŐ SZERKEZETŰ FELÜLETAKTÍV ANYAGOK ALKOTTA MICELLÁK KÉPZŐDÉSÉNEK VIZSGÁLATA KALORIMETRIÁS MÓDSZERREL

Seres László^a, Juhász Ádám^{a,b}, Csapó Edit^{a,b}

^aSzegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^bSzegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytani Intézet, MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, 6720 Szeged, Dóm tér 8.

A felületaktív anyagok széles körben használt vegyületek; aszimmetrikus polaritást eredményező molekulaszervezetük által képesek oldatfázisban asszociációs kolloidot (micella, nioszóma) képezni, valamint folyadék/gáz, illetve folyadék/folyadék határfelületen feldúsulni. Szolublilizáló-, stabilizáló- és emulgeáló sajátságuk révén széles körben alkalmazott ipari kemikáliák, de az előállított mennyiség több mint fele a háztartásokba kerül mosó- és tisztítószer formájában. Környezetünk megóvása érdekében hozott nemzetközi szabályozás ellenére a vízi élővilágba való kikerülésük továbbra is állandó kockázatot jelent, így a gyártott és felhasznált mennyiség csökkentése napjaink egyik fontos technológiai kihívása.

Alkalmazásközeleli technológiák megalkotásához azonban a felületaktív anyagok (tenzidek) oldat- és határfelületi viselkedését meghatározó fizikai-kémiai törvényszerűségek átfogó ismerete szükséges. A kevert micellák képződése évtizedek óta vizsgált jelenség, ám a kialakulásukat és az összetételüket meghatározó szabályszerűség a mai napig sem tisztázott [1]. A bemutatásra kerülő kísérleti munka során célom volt eltérő szerkezetű nemionos tenzidekből felépülő micellák képződésének tanulmányozása. A kutatás során a kritikus micellaképződési koncentrációk (cmc) összetétel és hőmérséklet függésének ismeretében az asszociációs kolloid összetételét, valamint a kialakulásukat kísérő entalpia- és entrópia változás mértékét határoztam meg. Az összegyűlt kísérleti eredmények arra engednek következtetni, hogy amikor a micella két komponense megfelelő arányban van jelen a vizes oldatban a kevert micella képződése kedvezményezett és az asszociáció alacsonyabb tenzid koncentrációnál (cmc) következik be, mint az egyedi tenzidekből felépülő micellák esetében. Utóbbi tapasztalatot a szakirodalom szinergikus/erősítő kölcsönhatásként értelmezi, amelynek részletes megértése segíthet olyan tenzidkeverékek kifejlesztésében, melyek hatékonyabban töltik be szolublilizáló-, stabilizáló- és emulgeáló szerepüket, így csökkenhet a felhasznált felületaktív anyagok mennyisége.

[1] Á. Juhász, E. Csapó, R. Tabajdi, I. Dékány, *Surfactants and Detergents*, **2017** (20), 1291-1299

Köszönetnyilvánítás: A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatásával a GINOP-2.3.2-15-2016-00034 számú projekt támogatta.

SZÉRUM ALBUMIN ALAPÚ KOMPOZITOK ELŐÁLLÍTÁSI LEHETŐSÉGEINEK VIZSGÁLATA

Kovács Nikolett Alexandra^a, Hornok Viktória^a, Csapó Edit^{a,b}

^aSzegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^bMTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, 6720 Szeged, Dóm tér 8.

A kinurenin útvonalhoz kapcsolható vegyületek és szintetikus származékaik kiemelkedő jelentőségűek a neurodegeneratív betegségek kezelésére irányuló terápiás készítmények fejlesztésében, azonban hátrányt jelent, hogy bizonyos vegyületek nem képesek megfelelő mennyiségben átjutni a vér-agy gáton [1]. A hatásos dózis beviteléhez szükséges a hatóanyagok kapszulázását megvalósítani, melyre jó alternatívát kínál a humán szérum albumin (HSA) alapú hatóanyag hordozó rendszerek fejlesztése a fehérje egyedi szerkezeti sajátágaiból eredően [1,2]. A hatóanyag/hordozó alkotta kompozitok előállítására több eljárás ismert az irodalomban (LbL, nanoprecipitáció *stb.*). Az áramlásos elven működő berendezések alkalmazása egy új lehetőséget jelenthet, melynek segítségével szabályozhatóvá válik a részecskék alakja, mérete ezáltal a bejuttatni kívánt hatóanyag mennyisége is [3].

Munkánk során különféle összetételű mag-héj szerkezetű, humán szérum albumin-alapú kinurénsav és szintetikus származékát tartalmazó kompozitok előállítását valósítottuk meg. Tanulmányoztuk többek között az áramlási sebesség és a komponensek arányának hatását a képződő kompozitok szerkezeti tulajdonságaira. Mindezek mellett a kompozitokból történő hatóanyag felszabadulás kietikájára is szolgáltatunk információkat.

- [1] N. Varga, E. Csapó, Z. Majláth, I. Ilisz, I.A. Krizbai, I. Wilhelm, L. Knapp, J. Toldi, L. Vécsei, I. Dékány, *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, **2016** (86), 67-74
- [2] B. Alvarez, S. Carballal, L. Turell, R. Radi, *Methods in Enzymology*, **2010** (473), 117-136.
- [3] R. Karnik, F. Gu, P. Basto, C. Cannizzaro, L. Dean, W. Kyei-Manu, R. Langer, O.C. Farokhzad, *Nano Letters*, **2008** (8), 2906-12

Köszönetnyilvánítás:

A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatásával GINOP-2.3.2-15-2016-00034 számú projekt keretében valósult meg. A kísérleti munkát az Emberi Erőforrások Minisztériuma a TUDFO/47138-1/2019-ITM (Csapó E.) és a Magyar Tudományos Akadémia, Bolyai János Kutatói Ösztöndíj is támogatta (Csapó E.)

POLIMER ALAPÚ KOLLOIDÁLIS GYÓGYSZERHORDOZÓK „KVÁZI” KÉTDIMENZIÓS SENZORTECHNIKÁK ÁLTALI JELLEMZÉSE

Varga Norbert^a, Juhász Ádám^a, Csapó Edit^{a,b}

^a*Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, Rerrich Béla tér 1., Szeged, H-6720, Magyarország*

^b*MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, Orvosi Vegytani Intézet, Általános Orvostudományi kar, Dóm Tér 8., H-6720, Magyarország*

Napjainkban a biológiai rendszerek modellezésére alkalmazható „kvázi” kétdimenziós szenzortechnikákat (pl.: felületi plazmon rezonancia (SPR) spektroszkópia, kvarc kristály mikromérleg (QCM)), egyre szélesebb körben alkalmazzák a gyógyszeripar és a biokémiai kutatások területén [1]. Nagy hatékonyságuk, kis mintaigényük és valós idejű jelfeldolgozásuk révén lehetségessé válik élettani jelentőségű ligandum-donor párok között fellépő kölcsönhatások vizsgálata szilárd/folyadék határfelületen [2]. A kölcsönható párok egyikének szenzorfelületre történő rögzítésével (immobilizálásával) tanulmányozhatjuk a molekulapárok közötti kötések kinetikai és termodinamikai sajátosságait, illetve a vegyületek szorpciós tulajdonságait.

A bemutatásra kerülő munka során biokompatibilis polimerek/poliszacharidok (pl.: PEG, hialuronsav, kitozán stb.) és funkcionizált szenzorfelületek közötti kötés jellegű kölcsönhatásának tanulmányozására került sor. A mérés technika egyedi elrendezése révén lehetőség nyílt a hordozó és a hatóanyag(ok) közötti kölcsönhatások modellezésére, ezáltal a hatóanyag hordozóhoz való affinitásáról valamint az adott kémiai környezetben feltételezett kötési mechanizmus helytállóságáról szerezhetünk információt. A hatóanyag kapszulázást és a kioldódást befolyásoló hatások ismeretében könnyedebben és nagyobb biztonsággal optimalizálhatjuk adott hatóanyagra a gyógyszerhordozó rendszerünket.

[1] Á. Juhász, M. Luty-Błoch, M. Wojnicki, G. K. Tóth, E. Csapó, *Microchemical Journal*, **2019** (147), 311-318

[2] E. Csapó, Á. Juhász, N. Varga, D. Sebők, V. Hornok, L. Janovák, I. Dékány, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **2016** (504), 471-478

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) GINOP-2.3.2-15-2016-00060 azonosító számú projektje támogatta. Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3-SZTE-321 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült (Varga Norbert).”

RIFAMPICIN POLIASZPARTAMID NANOSZÁLAS FORMULÁJÁNAK ELŐÁLLÍTÁSA SZEMÉSZETI ALKALMAZÁSRA

Vincze Anna^a, Balogh-Weiser Diána^{a,b}, Gyarmati Benjámín^a, Szilágyi András^a

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

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

Napjainkban a nanotechnológia szerepe egyre jelentősebb a gyógyszerészetben és az orvostudományban is. A különféle nanoszálal anyagok szerepe többek között a mesterséges szövetek előállításában és az intelligens hatóanyag-hordozó rendszerek fejlesztésében kiemelkedő fontosságú. Nagy fajlagos felületű rendezetlen nanoszálal mátrixokat hatékonyan lehet elektrosztatikus szálképzéssel előállítani különféle szintetikus és természetes polimerek oldatainak vagy olvadékainak felhasználásával [1]. A hatóanyag-hordozó rendszerekben alkalmazott polimerekkel szemben fontos elvárás, hogy biokompatibilisek és biológiailag lebonthatók legyenek. Az utóbbi években előtérbe kerültek a szintetikus poliaminosavak, mivel ezek hordozzák a természetes eredetű, biokompatibilis polimerek előnyeit, de emellett szerkezetük finomhangolható és előállításuk jól reprodukálható [2].

A poliaszpartamidok a poliaszparaginsav származékai, melyek a poliszukcinimid nukleofil ágensekkel történő gyűrűfelnnyitási reakciójában képződnek. Célul tűztük ki olyan poliaszpartamid nanoszálal mátrixok előállítását elektrosztatikus szálképzéssel, melyek hatóanyag-hordozó rendszerként a későbbiekben szemészeti alkalmazásra felhasználhatók. Az általunk választott poliaszpartamid-származékban a poliszukcinimidet 50-50%-ban 4-amino-butanollal és *n*-butil-aminnal módosítottuk. Célunk a vizes közegben bomlékony rifampicin antibakteriális hatóanyag nanoszálal formulájának előállítása annak érdekében, hogy a jelenleg kapható és csak körülményesen használható szemesepp helyett, a hatóanyagot jobban stabilizáló és könnyebben kezelhető szilárd készítmény alkalmazása a jövőben lehetővé váljon.

[1] N. Bhardwaj, S. C. Kundu; *Biotechnology Advances*, **2010** (28) 325-347.

[2] O. Pillai, R. Panchagnula; *Current Opinion in Chemical Biology*, **2001** (5) 447-451.

Köszönetnyilvánítás: A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatta (FK 125074). A kutatás az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-2 és ÚNKP-19-4 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült (ÚNKP-19-2-BME-370, ÚNKP-19-4-BME-421). Köszönjük az MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatását.

MELOXIKÁM TARTALMÚ POLIMER MICELLÁK FORMULÁCIÓJA ÉS VIZSGÁLATA

Sipos Bence^a, Ambrus Rita^a, Csóka Ildikó^a, Szabóné Révész Piroska^a, Katona Gábor^a

Szegedi Tudományegyetem Gyógyszerésztudományi Kar Gyógyszertechnológiai és Gyógyszerfelügyeleti Intézet, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.

A nano-gyógyszerhordozó rendszerek közül a polimer micellák is kiváló megoldást jelentenek, ha az adott rossz vízoldékonyságú farmakon e paraméterét valamint a biohasznosíthatóságát szeretnénk fokozni.[1] A polimer micella kialakításához amfifil graft co-polimert használtunk, melyeknél a részecskeméret optimálisan 80 nm, amely segíti a biológiai membránokon történő áthatolást.

A kutatásunk célja, hogy a non-szteroid gyulladáscsökkentő hatóanyagunkat polimer micellába zárjuk a biofarmáciai paraméterek javítása és a kedvezőbb terápiás felhasználás érdekében.

A formulációhoz etanolt és acetont használtunk, mint oldószer. Modell vegyületnek a meloxicámot (BCS II) választottuk, melyet folyamatos keverés mellett 1 M-os NaOH-oldat segítségével feloldottuk, majd a micellaképzőként használt Soluplus® (PEG 6000 – vinil-kaprolaktám – vinil-acetát 13:57:30 arányú keveréke) is feloldásra került. Az oldószerkeletet eltávolítottuk rotációs bepárlóval, így egy szilárd fázisú terméket kapva. A mintáinkat Box-Behnken design alapján készítettük el. A polimer micella teljes körű feltérképezéséhez meghatároztuk a termékek részecskeméretét, polidiszperzitását valamint anyagszerkezeti vizsgálatokat végeztünk XRPD, DSC, spektroszkópiai módszerekkel. In vitro kioldás és permeabilitás vizsgálatainkat mesterséges gyomor- és bélnedvben végeztük el.

Sikeresen optimalizáltuk a Box-Behnken faktoriális kísérletterv segítségével a polimer micellák formulációját. A részecskeméret megközelítette az irodalmi adatokat, az eloszlásgörbe monodiszperz. A műszeres vizsgálataink segítségével kimutattunk intermolekuláris kötéseket, polimorfizmusra való hajlamát valamint, hogy a polimer sikeresen bezárta a hatóanyagot. In vitro kioldás és permeabilitás vizsgálataink kielégítő eredményeket, kioldódási sebességnövekedést mutattak.

A Soluplus®, mint segédanyag kiválóan bizonyult a polimer micellák kialakításához. A polimer micellák fizikokémiai karaktere megfelelő volt és megfelelő nano-gyógyszerhordozó rendszer alakult ki. A meloxicám vízoldékonysága sikeresen növekedett.

[1] Jones, M. C., Leroux, J. C. *European journal of pharmaceutics and biopharmaceutics*, **1999** 48 (2), 101-111.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-2-SZTE-113. kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.

SZERVES KÉMIAI SZEKCIÓ III.

LIPOFIL OLDALLÁNCAL SZUBSZTITUÁLT CINKONA ALAPÚ ORGANOKATALIZÁTOROK SZINTÉZISE, ALKALMAZÁSA ÉS VISSZANYERÉSE

**Molnár Balázs^a, Kisszékelyi Péter^a, Nagy Sándor^a, Dargó Gyula^a, Fehér Zsuzsanna^a,
Huszthy Péter^a, Kupai József^a**

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

Napjainkban gazdaságossági és környezetvédelmi szempontból különösen indokolt a reakciókban alkalmazott katalizátorok visszanyerése. Az aszimmetrikus reakciók komponenseinek hatékony, mégis egyszerű elválasztására manapság egyre népszerűbb módszer a komponensek oldhatóságának megváltoztatása. Ez történhet egyrészt különböző organokatalizátorok egységeire [1], másrészt a katalizált reakció egyik reaktánsára [2] történő lipofil csoport bevitelével. Ennek köszönhetően a reakcióelegy komponensei között jelentős különbség lép fel a polarításban, ami lehetővé teszi, hogy azok egy extrakciós lépéssel egyszerűen elválaszthatóak legyenek egymástól.

Célul tűztem ki, hogy kidolgozzak egy általánosítható, lipofil oldallánc bevitelét megvalósító szintetikus módszert. A lipofilizált katalizátorokat ezután előzőleg mágneses nanorészecskéhez rögzített ciklodextrinnel kötém meg, és így azok egy egyszerű mágnes segítségével kinyerhetőek lennének a reakcióelegyből.

A lipofil csoport bevitelére alkalmas szintetikus építőelem kialakításához metil-galláttól indultam ki, ezt reagáltattam oktadecil-bromiddal. Az így kapott termék észtercsoportját lúgosan elhidrolizáltam, így jutottam egy három oktadecilcsoportot tartalmazó karbonsav származékhoz. A savnak egy, a hidrokinninből előállított aminoetiloxi-szubsztituált cinkona-négyzetamid katalizátorának aminocsoportjához való rögzítését vizsgáltam különböző kapcsolószerek segítségével.

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

[2] X. Wang, T. Yang, X. Cheng, Q. Shen; *Angewandte Chemie International Edition*, **2013** (52) 12860-12864.

A szerzők köszönik a Richter Gedeon Talentum Alapítvány, az Emberi Erőforrások Minisztériuma Új Nemzeti Kiválóság Program (ÚNKP-19-1-I-BME-286, ÚNKP-19-4-BME-415) és az OTKA (nyilvántartási szám: K128473) anyagi támogatását.

HIDROBENZOIN-ALAPÚ ÚJRAHASZNÁLHATÓ KIRÁLIS KONONAÉTEREK SZINTÉZISE ÉS ALKALMAZÁSA

Oláh Attila László^a, Nemcsok Tamás^a, Rapi Zsolt^a, Bakó Péter^a

^a*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Műegyetem Rakpart 3.*

Napjainkban egyre nagyobb jelentőséget nyer a zöld kémia és a környezet megóvása. A zöldkémiai törekvések célja, hogy a kémiai reakciók és folyamatok tervezését meghatározott szabályrendszer segítségével végezzük, ezáltal visszaszorítva a környezet szennyezését és a veszélyes anyagok használatát a vegyiparban [1].

A fázistranszfer katalízis több szempontból is eleget tesz a zöld kémia elvárásainak, mivel általában lehetőséget biztosít, hogy enyhébb körülmények között, „zöldebb” oldószerek és reagensek felhasználásával valósítsunk meg reakciókat pl.: Na₂CO₃ bázisként való használata szerves közegben, vagy a víz mint oldószer alkalmazása [2]. Az aszimmetrikus fázistranszfer katalízis iránt jelentősen megnőtt a tudományos érdeklődés az elmúlt harminc évben. Számos különböző királis katalizátort szintetizáltak és teszteltek különböző reakciókban, több esetben kiváló enantioszelektivitással [3]. A legtöbb királis fázistranszfer katalizátor szintézise bonyolult és költséges, regenerálásuk általában nem megoldott, vagy körülményes (pl.: kromatográfiás tisztítást igényel). Napjainkban több próbálkozás is történt újrafelhasználható királis fázistranszfer katalizátorok előállítására, leginkább polimerhez rögzített cinkonaalkaloid-alapú ammóniumsók esetén. A bemutatott kutatás célja egyszerűen és jó termeléssel visszanyerhető királis fázistranszfer katalizátorok szintézise könnyen hozzáférhető és olcsó kiindulási anyagokból, illetve ezen makrociklusok tulajdonságainak vizsgálata aszimmetrikus szintézisekben.

- [1] Anastas, P. T., & Warner, J. C.: *Green chemistry: theory and practice.*, Oxford University Press, Oxford **1998**.
- [2] Mieczyslaw Makosza.: *Phase-transfer catalysis. A general green methodology inorganic synthesis.* Pure Appl. Chem. **2000**, 72 (7): 1399–1403.
- [3] (A) K. Ariga, T. Kunitake: *Supramolecular Chemistry - Fundamentals and applications*, Springer, Berlin, Heidelberg, **2006**.
- (B) P. J. Cragg: *Supramolecular Chemistry: From Biological Inspiration to Biomedical Applications*, Springer Dordrecht Heidelberg London New York, **2010**.
- (C) J. L. Atwood, L. Barbour, G. W. Gokel: *Comprehensive Supramolecular Chemistry II.*, Elsevier, Amsterdam, **2017**.

ANTIVIRÁLIS NEURAMINSAV-SZÁRMAZÉKOK SZINTÉZISE

Lőrincz Eszter Boglárka^{a,b}, Bakai-Bereczki Ilona^a, Herczegh Pál^a, Borbás Anikó^a

^a DE-GYTK, Gyógyszerészi Kémia Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Debreceni Egyetem, Gyógyszerészeti Tudományok Doktori Iskola

Az influenza világszerte elterjedt betegség, kórokozóját a 10 leghalálosabb vírus között tartják számon. A WHO 2019-ben hívta fel a figyelmet arra, hogy az influenza napjaink egyik legfenyegetőbb világjárványát okozhatja, ezért sürgető feladat az új hatásmechanizmusú influenzaellenes gyógyszerek kutatása és kifejlesztése [1].

Az influenza felületén két fontos glikoprotein található: a neuraminidáz és a hemagglutinin. Az utóbbi a vírus megtapadásáért felel a gazdasejtek felületén, az első pedig a vírus szaporodása után a vírusrészecskék gazdasejtről való elszakadását segíti. A jelenleg forgalomban levő és általánosan használt influenzavírus-ellenes vegyületek az utóbbi folyamatot akadályozzák meg, de hatékonyságuk nem megfelelő. Hemagglutinatingató szer még nincs forgalomban, pedig a vírus megtapadásának gátlásával a fertőződés is megakadályozható, és így a mutációk kialakulása is gátolható lenne.

A szervezetben a hemagglutinin a sejtek felületén levő receptorok végén található neuraminsav egységekhez kötődik és trimer szerkezete révén egyszerre három neuraminsavhoz képes kapcsolódni. Potenciális hemagglutinatingatók előállítása céljából lipofil neuraminsav-származékok szintézisét terveztük. A lipofil oldalláncokkal ellátott amfifil származékok vizes oldatban aggregációra hajlamosak. Az így kialakuló aggregátumok felületén neuraminsav molekulák sorakoznak, imitálják a gazdasejt felületét és csapdába csalhatják az influenzavírust. Másrészt, kölcsönhatva a gazdasejt vagy a vírus lipid kettősrétegével szintén megakadályozhatják a vírus megtapadását a gazdasejt felületén.

[1] Global influenza strategy 2019-2030, World Health Organization **2019**, ISBN 978-92-4-151532-0 (<https://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/311184/9789241515320-eng.pdf?ua=1>)

Köszönetnyilvánítás: A kutatást az EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00009 című projekt támogatta, amely az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

FOTOINICIÁLT TIOL-ÉN ADDÍCIÓS REAKCIÓK TELÍTETLEN MONO- ÉS DISZACHARIDOKON

Kelemen Viktor^{a,b}, Bege Miklós^{a,b}, Eszenyi Dániel^a, Debreczeni Nóra^{a,c}, Herczegh Pál^a, Borbás Anikó^a

^aDebreceni Egyetem, Gyógyszerészi Kémia Tanszék. 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^bDebreceni Egyetem, Gyógyszerészeti Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Nagyerdei körút 98.

^cDebreceni Egyetem, Kémiai Tudományok Doktori Iskola. 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Az α -glikozidos kötéssel rendelkező szénhidrátok rendkívüli mértékben elterjedtek a természetben, a kicsiny prokariótáktól egészen a fejlett organizmusokig. Az *O*-glikozidos kötés viszont természetéből adódóan könnyen bontható enzimatikusan, így figyelmünket a biológiailag releváns szénhidrátok *S*-glikozidos kötésű mimetkumai felé fordítottuk. A tiokötésű glikokonjugátumok biológiai környezetben stabilak, ezért glikobiológiai vizsgálatokra és gyógyszerfejlesztésre alkalmasabbak a természetes *O*-glikozidoknál. Az 1,2-cisz- α -tioglikozidos kötés sztereoszelektív kialakítása azonban laboratóriumi körülmények között igen nehéz feladat, és az irodalomban nem találtunk általánosan alkalmazható eljárást erre a kötéstípusra. Fotoiniciált tiol-én addíciós reakcióval már sikerült kiváló regio- és sztereoszelektivitással előállítani tiodiszacharid mimetikumokat, exoglikálok és szénhidráttiolok reakciójával [1]. Ezt a módszert 2-szubsztituált glikálokra alkalmaztuk, és megállapítottuk, hogy kiválóan alkalmas a nehezen előállítható 1,2-cisz- α -glikozidos kötés sztereoszelektív létrehozására [2]. Megfigyeltük, hogy a reakció rendkívül szokatlan hőmérsékletfüggést mutat, a hűtés elősegíti, a melegítés pedig gátolja a reakció végbemenetelét [3]. Éppen ezért kiterjesztettük a reakciót további telítetlen szénhidrátokra és tiolokra, vizsgálva a reakciókörülmények változtatásának hatását a konverzióra és az izolált hozamra.

[1] M. Fiore, A. Marra, A. Dondoni, *J. Org. Chem.*, **2009**, 74 (11), 4422–442

[2] L. Lázár, M. Csávás, M. Herczeg, P. Herczegh, A. Borbás, *Org. Lett.* **2012**, 14, 4650–4653

[3] D. Eszenyi, V. Kelemen, F. Balogh, M. Bege, M. Csávás, P. Herczegh, A. Borbás, *Chem. Eur. J.* **2018**, 24, 4532–4536.

A publikáció, illetve az annak keretében ismertetett tudományos eredmény a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Richter Gedeon Talantum Alapítvány (székhely: 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.) támogatásával, „Richter Gedeon PhD Ösztöndíj” keretében, valamint az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-19-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült. A kutatást a GINOP-2.3.2-15-2016-00008, és a ”Debrecen Venture Catapult Program” EFOP-3.6.1-16-2016-00022 számú projekt is támogatta. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

ÉLŐSEJTEK SZOL-GÉL IMMOBILIZÁLÁSA BIOTRANSZFORMÁCIÓS CÉLOKRA

**Tóth Gergő Dániel^a, Nagy-Győr László^a, Dr. Hornyánszky Gábor^a, Prof. Poppe László^a, Dr.
Balogh Diána^{a,b}**

^aBME Szerves Kémia és Technológia Tanszék 1111, Budapest Műegyetem rkp. 3.

^bBME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék 1111, Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A modern kutatások egyik legfontosabb törekvése a környezetbarát, fenntartható technológiák feltárása, kidolgozása és alkalmazása. Ehhez a törekvéshez kapcsolódóan, kutatásaink egyik célja az eddig ipari gyakorlatban használt szintézisutak lerövidítése, az atomhatékonyság, a kemo-, regio-, és sztereoszelektivitás növelése, valamint az alkalmazott reakciókörülmények erélyességének csökkentése. Ezekhez eléréséhez ígéretes segítséget jelenthetnek a korszerű biokatalizátorok.

Különböző biokatalitikus eljárásokhoz felhasználhatunk izolált és tisztított, esetleg liofilizált enzimeket, vagy akár egész sejteket is. Az egész sejtek előnye, hogy alkalmazásuk során nincs szükség a felhasználni kívánt enzimek kinyerésére, a segédanyagok (pl: segéd enzimek, kofaktorok) biztosítására, ami sok esetben komoly technológiai limitációkat jelentene. Hátrányos azonban az egészsejtes rendszerek nagyfokú szenzibilitása a környezetükre, valamint a sejtekben egyidejűleg jelen lévő különböző enzimek okozta konkurens mellékreakciók lejátszódása. A sejtek magas környezeti érzékenységét leghatékonyabban különböző rögzítési módszerekkel csökkenthetjük. Ezen eljárások járulékos előnye, hogy nem csak a sejt ellenállóképességét, stabilitását növelik, hanem a katalizált reakció lejátszódását követően a biokatalizátor készítmény visszanyerhetőségét is lehetővé teszik.

Kutatómunkánk során szol-gél eljárással kialakítható nanopórusos mátrix kifejlesztését tűztük ki célul. A folyamat során tetraetoxiszilán savas hidrolízisét követő polikondenzációval alakítható ki a térhálós gél, mely in situ képes a jelenlévő sejtet önmagába csapdázni.[1,2] A sejtrögzítési kísérletekhez egy jelentős biokatalitikus potenciállal rendelkező, a *Lodderomyces elongisporus* törzsből származó élesztősejtet alkalmaztunk modell mikroorganizmusként. Összehasonlítottuk a de novo fermentációval előállított, a fermentléből centrifugálással elválasztott nedves élesztősejtek, liofilizált sejtek, szol-gél eljárással immobilizált, illetve templát hordozó jelenlétében szol-gélbe ágyazott készítmények biokatalitikus működését. A biokatalizátorok hatékonyságát a sejt piruvát-dekarboxiláz aktivitásán alapuló aciloin kondenzációban vizsgáltuk, melyet királis állófázisú gázkromatográfiával követtük nyomon.

FIZIKAI KÉMIAI SZEKCIÓ

ÁRAMLÁSVEZÉRELT CSAPADÉKKÉPZŐDÉS VÉKONY FOLYADÉKRÉTEGBEN

Balog Edina^a, Schusztér Gábor^a

^aSzegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

A csapadékképződéssel járó kémiai reakciók és az oldatok mozgásából eredő hidrodinamikai kölcsönhatások megfelelő hangolásával szabályozni tudjuk a rendszerek dinamikus viselkedését, mely lehetőséget nyújt tetszőleges térbeli szerkezetek kialakítására. A különböző térbeli gradiensekben (pl.: koncentráció, pH, sűrűség, mágneses térerősség, stb.) rejlő termodinamikai hajtóerőt kihasználva új, termodinamikai értelemben kevésbé stabil anyagok is előállíthatók [1]. Térbeli gradiensekkel operáló folyamatok tanulmányozása áramlásvezérelt rendszerekben is végrehajtható.

Munkám során áramlás hatására kialakuló csapadékmintázatokat tanulmányoztam vékony folyadékrétegben. Korábbi kísérleteink során megfigyeltük, hogy a kísérleti paraméterek változtatása (áramlási sebesség, reaktánsok kémiai természete és koncentrációja, stb.) nagymértékben befolyásolja a kialakult szilárd fázis mennyiségét és térbeli eloszlását. Továbbá a csapadékszemcsék fizikai tulajdonságai (pl.: méret, számszám, stb.) is jelentősen függenek a reagensek kémiai jellegétől és a reakció kinetikájától, melyek befolyásolják a makroszkópiusan látható mintázatokat kialakulását [2].

Jelenlegi kutatásaink során célul tűztük ki alkáliföldfém-karbonát és -oxalát csapadékmintázatok előállítását két Plexi lap közé zárt vékony folyadékrétegben, áramlásvezérelt rendszerben. Annak érdekében, hogy ne csak az áramlási sebesség, hanem más paraméterek hatásáról is információt tudjunk szerezni, az egyes reaktánsok koncentrációját és azok sztöchiometriai arányát is változtattuk. Az előállított csapadékmintázatok makroszkópius jellemzése mellett célunk volt még vizsgálni azok mikroszerkezetét is. Ehhez *in situ* módon, a reakciót követően gélbe ágyazva konzerváltuk a csapadékmintázatokat, majd vizsgáltuk azokat SEM segítségével. A csapadékszemcsék mikroszerkezetének és a reakciók kinetikájának ismeretében kerestük a magyarázatot a makroszkópius csapadékmintázatok jellegzetes hasonlóságainak és különbségeinek kialakulására.

[1] B. Bohner, G. Schusztér, O. Berkesi, D. Horváth, Á. Tóth; *Chemical Communications*, **2014** (50) 4289-4291.

[2] E. Balog, K. Bittmann, K. Schwarzenberger, K. Eckert, A. De Wit, G. Schusztér; *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2019** (21) 2910-2918.

Köszönetnyilvánítás: Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-2 kódszámú Új Nemzeti

Kiválósági Program-jának szakmai támogatásával készült.



A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ REAKCIÓ POTENCIÁLISENERGIA-FELÜLETÉNEK FEJLESZTÉSE KÜLÖNBÖZŐ KVANTUMKÉMIAI SZINTEKEN

Tasi Domonkos Attila^a és Czakó Gábor^a

^aSzegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Interdiszciplináris Kiválósági Központ és Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Nagy pontosságú *ab initio* kvantumkémiai módszerek segítségével korábban meghatározásra kerültek a $\text{X}^- + \text{CH}_3\text{Y}$ [$\text{X} = \text{OH}, \text{SH}, \text{CN}, \text{NH}_2, \text{PH}_2$; $\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$] $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók Walden-inverziós, előlről támadásos, illetve a dupla inverziós mechanizmusok stacionárius pontjai [1,2]. Jelen munkánk során, ezen $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók közül, a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakcióra MP2/aug-cc-pVDZ módszerrel globális, analitikus *ab initio* potenciálisenergia-felületet (PES) fejlesztettünk a permutációra invariáns polinomok módszere, illetve a kutatócsoportunk által fejlesztett ROBOSURFER program segítségével [3]. Az így létrejött PES energiapontjait további 6 pontosabb *ab initio* kvantumkémiai módszerrel meghatároztuk. Ezen összesen 7 különböző PES-t felhasználva a kvázi-klasszikus trajektória módszer alkalmazásával vizsgáltuk hogyan változik a reakció dinamikája az *ab initio* kvantumkémiai módszer függvényében.

[1] D. A. Tasi, Z. Fábán, G. Czakó, *The Journal of Physical Chemistry A*, **2018** (122) 5773–5780.

[2] D. A. Tasi, Z. Fábán, G. Czakó, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2019** (21) 7924–7931.

[3] T. Györi, G. Czakó, Beküldés alatt, **2019**

NANOMÉRETŰ Gd(III)-KOMPLEXEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS VIZSGÁLATA

Miklósi Tamás Sándor^a, Novák Levente^a, Bányai István^a

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék; Debrecen Egyetem tér 1.

A Gd(III)-iont elterjedten használják kontrasztanyagként az mágneses-rezonancia képalkotáshoz, amely az egyik leghatékonyabb orvosi diagnosztikai eljárás. Mivel a fémion maga mérgező, ezért különböző kelát-komplex formájában juttatják be az emberi szervezetbe. A kontraszthatás a fémion mágneses momentumától, legalább egy koordinált vízmolekula jelenlététől és a komplex méretétől függ, ezért kiterjedt kutatások folynak a kisméretű fémkomplexek kolloid méretű részecskékre való illesztésére. [1]

A mi megközelítésünk az volt, hogy megvizsgáljuk a Gd(III)-ionok komplexképződési tulajdonságait egy makromolekulás (nagy méretű) ligandummal. Választásunk a kutatócsoportban korábban előállított karboximetilezett-poli-etiléniminre esett (CM-PEI). A polietilén-imint különböző mértékben funkcionalizáltuk, majd a kapott ligandumokat NMR-technikákkal jellemeztük (COSY, NOESY, ¹H-NMR, ¹³C-NMR, HMBC stb.). [2] Az NMR-spektrumok alapján meghatároztuk a karboximetilezési reakció konverzióját, valamint a makromolekula szerkezetét és méretét, a legnagyobb elért konverzió 66%-os volt. A ligandum komplexképződését Gd(III)-ionokkal kiterű NMR-relaxometriával vizsgáltuk, Bruker 20 MHz-es NMR-relaxométerrel. A komplexképződési folyamatok relaxometriával, azaz a komplexnek a vízmolekulák protonjaira gyakorolt relaxáció-növelő hatása alapján (R_1 és R_2) jól nyomon-követhetőek voltak. A pH-függvényében kapott R_1 és R_2 adatokból következtettünk a komplex stabilitására és szerkezetére.

- [1] C-H. Huang, A. Tsourkas; Gd-based macromolecules and nanoparticles as magnetic resonance contrast agents for molecular imaging, *Curr. Top Med. Chem.*, **2013**; 13(4): 411–421.
- [2] L. Novák, P. Visznecki, R. Zékány, X. Shi, I. Bányai; Synthesis, characterisation and relaxivity enhancing effect of carboxymethylated polyethyleneimine, *10th International dendrimer Symposium, Book of abstract*, 87, (2017), Weihai, China

A kutatás a GINOP-2.3.2.-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

EGYOLDALÚ NMR: AZ NMR MOUSE REJTELMEI

Nyul Dávid, Novák Levente, Bányai István

Debreceni Egyetem, TTK, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Az NMR spektroszkópia korunk legdinamikusabban fejlődő szerkezet- és anyagvizsgáló módszere. Előnye, hogy a különböző korrelációs technikákkal az anyag beazonosításán kívül (COSY, HSQC, HMBC) annak szerkezetéről (NOESY, ROESY) annak méretéről (DOSY) és morfológiájáról is információt kaphatunk (NMR-krioporozimetria és relaxometria). Hátránya, a műszer viszonylagos nagy bekerülési és fenntartási költsége és a kis érzékenység. Az érzékenység növelhető, de ez együtt jár a költségek nagymértékű növekedésével. Minden olyan törekvés és megoldás, ami csökkenti a költséget és a legtöbbet megtar a módszer értékeiből előnyös lehet. PhD munkám egyik fontos eleme a permanens mágnessel működő kis felbontású NMR (TD-NMR) alkalmazása polimerek, gélek és szilárd minták vizsgálatára, valamint olyan minták vizsgálatára, amelyek csőbe töltése problémás (*pl.* in vivo vizsgálatok). [1] Előadásomban ennek az egyoldalú mágneses vizsgáló módszer (NMR MoUSE: Mobile Universal Surface Explorer) elméletéről és néhány gyakorlati alkalmazásáról fogok beszélni elsősorban saját eredmények tükrében. [2]

Az NMR-MoUSE technika különleges sajátága a permanens mágneses térgradiens jelenléte, ami megfelelő kiértékelési módszerek kifejlesztésével előnnyé kovácsolható a hagyományos TD-NMR technikákkal szemben. Bemutatjuk a viaszokban található fázisok megkülönböztetését diffúziómérés alapján speciális mintaelőkészítés nélkül. A módszer eredményesnek bizonyult emberi bőr felszínének vizsgálatára és attól különböző távolságra lévő rétegek jellemzésére is. Információt kaptunk a rétegek hidratáltságára és a diffúziós viszonyokra, amelyeknek diagnosztikus értéke lehet. [3]

[1] B. Blümich; *Trends in Analytical Chemistry*, **2016** (83) 2-11.

[2] B. Blümich, P. Blümmler, G. Eidmann, A. Guthausen, R. Haken, U. Schmitz, K. Saito, G. Zimmer; *Magnetic Resonance Imaging*, **1998** (16) 479–484.

[3] E. Bergman, Y. Sarda, N. Ritz, E. Sabo, G. Navon, R. Bergman, U. Nevo; *NMR in Biomedicine*, **2015** (28) 656-666.

A kutatás a GINOP-2.3.2.-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

POLIMORFOK EGYENSÚLYI OLDHATÓSÁGÁNAK VIZSGÁLATA HAGYOMÁNYOS MÓDSZERREL ÉS VALÓS IDEJŰ KÖVETÉSSEL

Csicsák Dóra^a, Jaksáné Borbás Enikő^b

^a*Semmelweis Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Intézet, 1092 Budapest, Högyes Endre utca 9.*

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

A polimorfia vizsgálata rendkívül fontos a gyógyszerkutató és –fejlesztés során, mivel a módosulatok eltérő fizikai-kémiai tulajdonságai hatással lesznek többek között a stabilitásra, oldhatóságra, kioldódásra, mindezekeken keresztül pedig befolyásolják az anyag biohasznosulását.

A polimorf módosulatok oldhatóságának vizsgálata nehézségekbe ütközik, mivel oldószer jelenlétében változások következhetnek be a vegyület kristályszerkezetében: a kevésbé stabil forma átalakulhat a stabilabb formává; oldószertől függően hidrát vagy szolvát keletkezhet; illetve megfelelő pH tartományban sók képződhetnek. Éppen ezért a polimorfok egyensúlyi oldhatósági vizsgálatait mindenképpen szükséges kiegészíteni szilárd fázisú analízissel, hogy pontos információt kapjunk az esetleges átalakulásokról.

Munkánk során karvedilol két polimorf módosulatának pH függő egyensúlyi oldhatóságát vizsgáltuk standard protokoll szerint, pH 3-11 tartományban, hagyományos rázótolcséres módszerrel, valamint μ DISS készülék segítségével. A méréseket kétféle oldatban végeztük: standard ionerősségű Britton-Robinson (B-R) tompítóoldatban, illetve olyan B-R tompítóoldatban, amelyben az ionerősséget 0,15 M KCl-dal módosítottuk. Az oldhatósági eredményeket összevetettük a Henderson-Hasselbalch egyenlet által prediktált értékekkel. Két különböző pH-jú tompítóoldatban (6 és 6,5) in situ UV szondák segítségével valós időben követtük az egyensúly beállásának folyamatát, így pontos információt nyertünk az egyensúlybeállítás idejéről, valamint a túltelítés mértékéről is. Az oldhatósági mérések végén elvégeztük a minták szilárd fázisú analízisét röntgen módszerrel. Megállapítottuk, hogy a két forma oldhatósága között kb. kétszeres eltérés figyelhető meg. Igazoltuk továbbá, hogy a két polimorf kristályszerkezete nem változik a mérés során, nem alakul át egyik a másik formává; valamint azt, hogy savas pH tartományban ($\text{pH} \leq 6,5$) sókiválás figyelhető meg, melynek ellenionja és oldhatósága eltérő a különböző tompítóoldatokban.

Köszönetemet szeretném kifejezni témavezetőmnek, Völgyi Gergelynek, illetve Takácsné Novák Krisztina professzorasszonynak a munkámhoz nyújtott segítségért és támogatásért.

CSAPADÉKKÉPZŐDÉS MODELLEZÉSE MIKROFLUIDIKÁS REAKTORBAN

Papp Paszkál^a, Tóth Ágota^a, Horváth Dezső^b

^a*Szegedi Tudományegyetem Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék 6720 Szeged
Rerrich Béla tér 1*

^b*Szegedi Tudományegyetem Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék 6720 Szeged
Rerrich Béla tér 1*

A csapadékképződés mindennapi életünk megkerülhetetlen része. Ezek lehetnek szemet gyönyörködtetőek, mint például egy diffúziós front hatására kialakuló Liesegang-mintázat vagy a korallnövények. A természetben azonban a diffúzióhoz leggyakrabban közegmozgás is társul, melynek együttes megjelenését áramlásvezérelt csapadékképződésnek is nevezzük. Ilyen folyamatok modellezésével nemcsak a természetben előforduló jelenségek, hanem a szervezetünkben is lejátszódó folyamatok, mint például a vesekő képződése is, tanulmányozhatók.

Csapadékképződési reakció során a rosszul oldódó vegyület, a kísérleti körülményektől függően, változó sztöchiometriai összetétellel kristályosodhat ki az oldatból. Kutatócsoportunknak sikerült egy olyan módszert kialakítani, amely során a termodinamikailag kevésbé stabil vegyületek állíthatók elő kontrolláltan. Bemutattuk, hogy vizes közegben a kalcium-oxalát monohidrát helyett, a természetben ritkábban előforduló és termodinamikailag instabilis kalcium-oxalát dihidrát jön létre [1]. Ez utóbbi a vesekő anyagának jelentős részét kitevő vegyület.

A közelmúltban a mikrofluidikás reaktorok egyre nagyobb teret hódítottak számos tudomány területen, mint például a bioanalitikai kémiában, vagy a szintetikus szerves kémiában. Az anyagtudományok terén is kiemelkedően fontos a mikrofluidika, ugyanis segítségével különböző fém-oxid félvezető nanorészecskék állíthatók elő [2]. A mikrofluidikás eszköztár kiváló lehetőséget nyújt a vesekőképződés mesterséges reprodukálására áramlásvezérelt körülmények között [3] és ezzel egy időben a vesevezetékben lévő áramlási viszonyok számítógépes modellezése még most veszi kezdetét [4]. Munkánkban az áramlást leíró Navier-Stokes egyenlet megoldásán felül, a kialakuló csapadék részecskéket is figyelembe vesszük a modellünk felállításakor. A szilárd részecskék létrejöttéből, áramlásából, és ülepedéséből bővebb információt nyerhetünk a vesevezetékben uralkodó áramlási profilról.

- [1] B. Bohner, B. Endródi, D. Horváth, Á. Tóth; *J. Chem. Phys.*, 2016 144, 164504 [2] A. Abou-Hassan, O. Sandre; V. Cabuil; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010 49, 6268
[3] G. Laffite, C. Leroy, C. Bonhomme, L. Bonhomme-Coury, E. Letavernier, M. Daudon, V. Frochot, J.P. Haymann, S. Rouzière, I.T. Lucas, D. Bazin, F. Babonneau, A. Abou-Hassan; *Lab Chip.*, 2016 16, 1157
[4] A. Mosayyebi, D. Lange, Q. Y. Yue, B. K. Somani, X. Zhang, C. Manes, D. Carugo; *Biomicrofluidics*, 2019 13, 014101

FÉLVEZETŐ ELEKTRODOK OPTOELEKTRONIKAI TULAJDONSÁGAINAK TANULMÁNYOZÁSA

Balog Ádám^a, Samu Gergely Ferenc^{a,b}, Janáky Csaba^{a,b}

^aSzegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^bELI-ALPS Kutatóintézet, 6720 Szeged, Dugonics tér 13.

A félvezetőket gyakran alkalmazzák a napenergia hasznosítására, melynek eredményeképpen elektromos, illetve kémiai energiához juthatunk. A napelemek esetén a fény által generált lyuk-elektron párok egy külső áramkörön keresztül áramként kinyerhetők, míg a fotoelektrokémiai cellák esetén ezen töltéshordozók az oldatban lévő reaktáns elektrokémiai átalakítására fordíthatók. Egy félvezető viselkedésének magyarázatakor gyakran figyelmen kívül marad, hogy csak nagyon ideális esetben érvényesül, hogy a vegyérték- és vezetési sáv közötti tiltott sáv nem tartalmaz különböző hibahelyeket, melyek jelentős hatással lehetnek az elektrokémiai tulajdonságokra. Jelenlétükkel változhat a tiltott sáv szélessége, ezáltal az elérhető maximális fotoáram nagysága, valamint ezen hibahelyek betölthetnek töltéshordozó donor, illetve akceptor szerepet is, melyek nagyban befolyásolják a félvezető elektromos tulajdonságait.

Az *in situ* spektroelektrokémiai módszerek az elektrokémiai impedancia spektroszkópiával (EIS) kiegészítve lehetőséget biztosítanak a különböző hibahelyek elektrokémiai tulajdonságokra gyakorolt hatásának vizsgálatára [1,2]. A különböző csapdahelyek töltéshordozókkal történő szelektív betöltése könnyen megvalósítható a potenciál változtatásával, a spektrális változások párhuzamos követése pedig lehetőséget biztosít ezen nívók energetikai elhelyezkedésének meghatározására. Az elektromos sajátságokra gyakorolt hatásuk ezután EIS mérésekkel kimutatható. Mindezek ismeretében pontosan meg tudjuk adni a félvezető optimális működési körülményeit, illetve akár hangolni is tudjuk a tulajdonságait, hogy az az adott alkalmazási területhez a legmegfelelőbb legyen. Előadásom során a CuI, a NiO és a TiO₂ félvezető elektródokról összegyűjtött eredményeimet fogom bemutatni.

[1] Á. Balog, Gergely F. Samu, P. V. Kamat, C. Janáky; *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **2019** (10) 259-264.

[2] Á. Balog, C. Janáky; *Journal of the Electrochemical Society*, **2019** (166) H3265-H3270.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.

FOTOELEKTROKÉMIAI AMMÓNIA SZINTÉZIS NITRÁT IONBÓL RÉZ-JODID/ÓLOM-JODID KOMPOZIT FOTOELEKTRÓDOKON

Kecsenovity Egon^{a,b}, Kochuveedu Saji Thomas^{a,b}, Janáky Csaba^{a,b}

^aSzegedi Tudományegyetem, Fotoelektrokémiai kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1, Magyarország

^bSzegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1, Magyarország

A XXI. században az emberiség egyik legnagyobb kihívásának tekinthető a megújuló energiaforrások felhasználásának tökéletesítése és szélesebb körű használata a jelenleg elterjedt nem megújuló energiaforrásokkal szemben. A számunkra elérhető legnagyobb megújuló energiaforrás a napfény, amelyet a fotoelektrokémia területén megszerzett közel 30 évnyi tudással kihasználhatunk.

A fotoelektródok képesek a napfény energiáját több módon is felhasználni: egyrészt a napenergia átalakítható elektromos árammá (napelemek), vagy elraktározható kémiai energia formájában. Ez utóbbi stratégiát követi a fotoelektrokémiai hidrogénfejlesztés vízből, vagy a szén-dioxid fotoelektrokémiai redukciójával történő átalakítása hasznos vegyipari alapanyaggá. Ezen felül egy további alkalmazási területe ezen eljárásoknak a környezeti kármentesítés, amelynek során a nehézfémeket vagy más ártalmas ionokat, távolítunk el az adott rendszerből fotoelektrokémiai módszerekkel.

A bemutatni kívánt munkában vizsgáltuk a réz-jodid/ólom-jodid kompozitból készült fotoelektródok viselkedését nitrát ion fotoelektrokémiai redukciójában. A kompozit fotoelektródokat ITO vezető üvegen készítettük el több összetétel mellett egy optimalizált vékonyfilm olvasztást alkalmazó technikával. Az kapott kompozitot nagyméretű hexagonális ólom-jodid kristályok alkották, melyekben és melyek között réz-jodid nanorészecskék helyezkedtek el. Az előállított kompozit fotoelektródokat többféle szerkezeti és (foto)elektrokémiai vizsgálatnak is alávetettük, valamint a nitrát ion fotoelektrokémiai redukcióban történő felhasználását vizsgáltuk hosszú távú mérésekkel és termékdetektálással.

Az eredmények azt mutatták, hogy a réz-jodid/ólom-jodid kompozit fotoelektródok közel háromszor olyan hatékonyak a nitrát ion fotoelektrokémiai redukciójában, mint a kompozitot alkotó anyagokból külön-külön készült fotoelektródok önmagukban. Ezen felül a nitrát-ion redukciójában keletkező termékek detektálásával kimutattuk, hogy a vizsgált kompozit elektródokon nagy Faraday-hatásfokkal (>30%) keletkezik ammónia gáz, nitrit-ion és nitrogén gáz mellett.

„Az innovációs és technológiai minisztérium UNKP-19-3-SZTE-132 kódszámú új nemezi kiválóság programjának szakmai támogatásával készült.”

ANYAGTUDOMÁNYI SZEKCIÓ II.

FENOTIAZIN KARBONSÁVAK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS INTERKALÁLÁSA RÉTEGES KETTŐS HIDROXIDOKBA I.

Nagy Sándor Balázs, Szabó Yvette, Lovász Tamás

Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Szerves Kémia Intézet

Az elmúlt évtizedek során a különböző fenotiazin származékok nagy érdeklődést váltottak ki az alkalmazott kémia különböző területein mint pl: festékek, gyógyszerek és rovarirtószerek, valamint adalékanyagok napelemekben. A fenotiazin alapú konjugált polimerek előállítása is egy nagyon fontos terület, mivel fenotiazinnal csökkenthető az ionizációs potenciál [1].

Célunk volt fenotiazinok mono- és dikarbonsav származékainak az előállítása, amely származékok nem veszítik el kromofor sajátágaikat. A karbonsav származékok jóval könnyebben immobilizálhatóak, például ionos vagy kovalens jellegű kötések kialakításával. Így lehetőség nyílt immobilizált kromofor vegyületek előállítására és felhasználására.

Emellett, a karboxil csoport bevitele a fenotiazin gyűrűbe nemcsak azért fontos, hogy új kromofor vegyületeket állítsunk elő, hanem azért is, mert ezek az anyagok intermedierei lehetnek funkcionizált fenotiazinok előállításának [2].

[1] X. Kong, A. P. Kulkarni, S. A. Jenekhe, *Macromolecules*, **2003**, (36), 8992–8999

[2] A. Bejan, L. Marin, B. Chiricuta, D. Ailincăi, B. C. Simionescu, *Rev. Roum. Chim.*, **2016**, (61), 291–297.

FENOTIAZIN KARBONSÁVAK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS INTERKALÁLÁSA RÉTEGES KETTŐS HIDROXIDOKBA II.

Szabó Yvette^a, Nagy Sándor-Balázs^a, Varga Gábor^{b,c}, Sipos Pál^{c,d}, Pálinkó István^{b,c}, Lovász Tamás^a

^a*Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Magyar Kémiai és Vegyészmérnöki Intézet, Arany János utca 11 szám, 400028 Kolozsvár,*

^b*Szerves Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Szeged, Dóm tér 8, Magyarország,*

^c*Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport, Kémiai Tanszékcsoport, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Szeged, Dóm tér 7-8, Magyarország*

^d*Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Szeged, Dóm tér 7, Magyarország,*

A réteges kettős hidroxidok (Layered Double Hydroxides, LDH-k) iránti érdeklődés jelentősen megnőtt az elmúlt évtizedekben, melyet változatos tulajdonságaiknak köszönhetnek [1]. A kompozitok rétegeinek kémiai összetétele és a rétegek közötti térbe beépíthető, interkalálható anionok anyagi minősége széles körben változtatható [2].

Figyelembe véve az LDH-k széleskörű felhasználhatóságát (mint katalizátorok vagy katalizátorhordozók, biológiailag aktív vegyületek, szerves szintonok hordozói, szenzorok, elektródok stb.) [2] valamint tekintettel a fenotiazin származékok szintén széleskörű felhasználási lehetőségeire a színezékipar, polimergyártás valamint a napelem bevonatok előállításánál, kutatásunk célja fenotiazin karbonsavak interkalálása (anioncsere) réteges kettős hidroxidokba, a kialakított kompozitok szerkezetvizsgálata (XRD, IR, SEM, TEM) és felhasználása, mint fluoreszcens festékek. Különböző réteges kettős hidroxidokat (CaAl-LDH, Mg₂Al-LDH, CoAl-LDH, NiAl-LDH) és fenotiazin karbonsavakat állítottunk elő, melyeket többféle módszerrel építettünk be az előállított LDH rétegek közé (dehidratáció-rehidratáció, delaminálás stb.).

[1] M. Sipiczki, V. Bugris, Sz. Mészáros, D.F. Srankó, Zs. Ferencz, M. Szabados, Á. Kukovecz, Z. Kónya, P. Sipos, I. Pálinkó; *Magyar Kémiai Folyóirat – Közlemények*, **2014**, (120), 106–115.

[2] F. Bergaya, B.K.G. Theng, G. Lagaly; C. Forano, T. Hibino, F. Leroux, C. Taviot-Guého; *Handbook of Clay Science, Layered Double Hydroxides*, **2006**, 1021.

Köszönetnyilvánítás: Köszönet az Erasmus+ programnak a lehetőségért és a Szegedi Tudományegyetem Anyag és Oldatszerkezeti kutatócsoportjának, hogy fogadott és helyet biztosított a kutatásnak.

ALUMÍNIUMBAN GAZDAG RÉTEGES KETTŐS ÉS HÁRMAS HIDROXIDOK ELŐÁLLÍTÁSA, SZERKEZETÜK JELLEMZÉSE

Papp Ádám^{a,b}, Ádám Anna Adél^{a,b}, Szabados Márton^{a,b}, Sipos Pál^{a,c}, Pálinkó István^{a,b}

^aSZTE, TTIK, Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport, H-6720, Szeged, Dóm tér 8

^bSZTE, TTIK, Szerves Kémiai Tanszék, H-6720, Szeged, Dóm tér 8

^cSZTE, TTIK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, H-6720, Szeged, Dóm tér 7

Napjainkban számos kutatás szentel kiemelt figyelmet a réteges kettős hidroxidoknak (LDH-k), amely gazdaságos szintézismódszereknek, különleges szerkezeti tulajdonságaiknak és széleskörű felhasználásuknak köszönhető.

Munkánk célja Ni(II)- és/vagy Cu(II)-tartalmú alumíniumban gazdag réteges kettős és hármás hidroxidok (LDH-k és LTH-k) előállítása, és a korábbról már ismert liotróp sor [1] kiegészítése a Cu(II)-ionokkal.

Kutatásunk során sikeresen szintetizáltunk Ni(II)- és Cu(II)-ionokat tartalmazó fázistiszta, alumíniumban gazdag LDH-kat és LTH-kat mechanokémiai úton gibbsit interkalációs technikával. A keletkező termékek szerkezetét röntgendiffraktométerrel (XRD), összetételét pedig pásztázó elektronmikroszkóphoz csatolt energiadisperzív röntgenanalizátor (SEM-EDX) segítségével tanulmányoztuk.

Először a Ni(II)- és Al(III)-ionok kiindulási molarányát állandó értéken tartva a Cu(II)-ionok mennyiségét kezdtük növelni. Egy bizonyos koncentrációhatár felett azonban réz-hidroxid-nitrát szennyeződés jelent meg. Ezt követően a Ni(II)-ionok mennyiségét csökkentettük, így minden esetben szennyeződésmentes terméket kaptunk.

A beépülési affinitások számszerűsítése érdekében CuZnAl-, CuCoAl-, NiZnAl- és NiCoAl-LTH-kat is előállítottunk, melyek SEM-EDX-el történő vizsgálata alátámasztotta a Cu(II)-ion liotróp sorbeli helyét: (Li(I)>>)Ni(II)>Cu(II)>>Co(II)~Zn(II). Mindemellett képesek voltunk számokban kifejezni a fémionok egymáshoz viszonyított beépülési affinitásait. A Ni(II)-ionok a Cu(II)-ionoknál négy-öttször jobban képesek beépülni a rácsszerkezet hibahelyeibe, a Cu(II)-ionok a Co(II)- és Zn(II)-ionokhoz képest tízszer és kilencszer nagyobb beépülést mutattak. További kísérleteink során megállapítottuk, hogy a négyféle fémiont tartalmazó (NiCuCoAl és NiCuZnAl) réteges szerkezetű anyagok esetén az ionok beépülési sorrendje nem változik.

Összegésként elmondható, hogy sikeresen állítottunk elő Ni(II)- és/vagy Cu(II)-ionokat tartalmazó fázistiszta LDH-kat és LTH-kat, mely segítségével a korábbról ismert, de hiányos liotróp sort ki tudtuk egészíteni.

[1] G. R. Williams, S. J. Moorhouse, T. J. Prior, A. M. Fogg, N. H. Rees, D. O'Hare, *Dalton Transactions*, **2011** (40) 6012.

KÉTDIMENZIÓS FÉLVEZETŐ NANOLAPOK FOTOELEKTROKÉMIAI VIZSGÁLATA

Szabó Gábor,^a Tóth Péter Sándor,^{a,b} Janáky Csaba^a

^a Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, ^b MTA Prémium Posztdoktori Kutatói Program, Szegedi Tudományegyetem, Rerrich Béla tér 1., 6720 Szeged

A különböző kétdimenziós félvezető anyagok napjainkra nagy jelentőséget kaptak (foto)elektrokémiai alkalmazásokban. Ezen anyagok közös jellemzője, hogy rétegeik számát csökkentve egyes fizikai tulajdonságaik számottevően megváltoznak a tömbi fázisú kristályhoz képest [1]. Ezen anyagok megfelelő alkalmazásához az energiatárolásban/átalakításban, szükséges, hogy viselkedésüket megértjük a felületi egységek (pl.: rétegek száma, síkon belüli hibahelyek, síkélek) függvényében.

Kutatócsoportunk erre a célra fejlesztette ki az úgynevezett fotoelektrokémiai mikroszkópiát, amellyel különböző módokon előállított mintákat tudunk vizsgálni mikroszkopikus szinten. Munkánk során először mikromechanikus exfoliálással előállított MoSe₂ és WSe₂ nanolapokat vizsgáltunk, amelyek energiatárolás és -átalakítás szempontjából lehetnek fontosak [2-3]. A méréseket egy háromelektrodos rendszerben végeztük el, ahol az elektrokémiai cellát egy, a nanolap felületén leválasztott oldatcsepp jelenti. A rétegek számát, illetve a különböző felületi hibákat Raman spektroszkópiával és atomerő mikroszkópiával azonosítottuk. A különböző szerkezeti egységek fotoelektrokémiai aktivitását a fent említett berendezéssel tanulmányoztuk lineáris fotovoltammetriával, illetve kronoamperometriás módszerrel a kvantumhatásfok meghatározása érdekében.

A tiltotsáv-szélesség értékek és spektroszkópiai módszerek segítségével meg tudtuk határozni a különböző vastagságú nanolemezek sávdiagramjait. Az aktivitás csökkenését elsődlegesen a nanolapok élei befolyásolják. Berendezésünk más fém-szulfid nanolemezek megbízható vizsgálatára is alkalmas, melyet az SnS₂ példáján mutatok be, ami számos területen alkalmazható (fotokatalízis, napelemek) [4].

[1] M. Velický and P. S. Toth, *Appl. Mater. Today*, **2017** (8) 68–103.

[2] A. E. Isenberg, M. A. Todt, Li Wang, J. B. Sambur, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2018** (10) 27780–27786.

[3] X. Yu, K. Sivula, *Chem. Mater.*, **2017** (29) 6863–6875.

[4] J. Yu, C. Y. Xu, F. X. Ma, S. P. Hu, Y. W. Zhang, L. Zhen, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2014** (6) 22370–22377.

AZ INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI MINISZTERIUM ÚNKP-19-2 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.

SZÉN NANOGÖMB ALAPÚ INVERZ OPÁL FOTONIKUS KRISTÁLYOK ELŐÁLLÍTÁSA

**Karajz Dániel Attila^a, Bakos László Péter^a, András Katona^a, Klara Hernadi^b, Bence Parditka^c,
Zoltán Erdélyi^c, István Lukács^d, Zoltán Hórvölgyi^e, Géza Szitási^f, Szilágyi Imre Miklós^a**

^aBME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

^bSZTE Alkalmazott és Környezeti Kémia Tanszék, H-6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^cDE Szilárdtest Fizika Tanszék, H-4032 Debrecen, Bem tér 18.

^dMTA-EK MFA, H-1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.

^eBME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, H-1111 Budapest, Budafoki út 8.

^fFemtonics Kft, H-1094 Budapest, Tűzoltó utca 59.

A fotokatalízist széles körben kutatják szerves szennyezők eltávolítására szennyvízből vagy levegőből napsugárzás felhasználásával. A legelterjedtebben vizsgált félvezető a TiO₂, melynek azonban a tiltott sávjának energiája az UV tartományba esik, ami a nap fényének mindössze 5 %-a. A nap fényének minél hatékonyabb kiaknázásának egyik lehetséges megoldása a tiltott sáv módosítása más anyaggal való dópólással, kompozit képzéssel. Egy másik megoldást jelenthet a fotonikus kristály szerkezet kihasználása, amelynek hatására, az anyag megfelelő tervezésével a látható fény tartományában idézhetjük elő a „lassú” foton jelenséget, mely nagyban megnöveli a kristály fényelnyelő képességét.

A kutatómunkánk során hidrotermális eljárással készült szén nanogömbök segítségével hoztunk létre kolloid kristályt mikroszkóp tárgy lemezen, kihasználva a nanogömbök önrendeződését. A templátot atomi réteg leválasztás (ALD) technikával bevontuk TiO₂-al, majd kemencében magas hőmérsékleten kiégettük a nanogömböket. A minta tetején maradt tömör TiO₂ réteget argon ion porlasztásos módszerrel eltávolítottuk, így végeredményben sikeresen előállítottuk a periodikusan üreges szerkezetű anatóz TiO₂ inverz opál kristályt.

Az előállított minták szerkezetének vizsgálatára pásztázó elektron mikroszkópot (SEM), energiadiszipatív röntgensugaras mikroanalízist (EDX), por röntgen diffrakciós vizsgálatot (XRD), Raman- és diffúz reflektanciás UV-látható spektroszkópiát (DR UV-VIS) alkalmaztunk. A minta fotokatalitikus tulajdonságait teszteltük két modell vegyületen (metilénkék és metilnarancs), UV és látható fényvel való megvilágítás esetében, és kidolgoztunk egy módszert, mellyel a minta felületén követhető a fotokatalízis folyamata vékony folyadék filmek esetében. A kutatás során sikeres fotokatalízist értünk el látható fényvel való megvilágítás mellett.

AMORF SZÉN HORDOZÓN IMMOBILIZÁLT ARANY ÉS PALLÁDIUM NANORÉSZECSKÉK SZINTÉZISE ÉS FELHASZNÁLÁSA A SZÉN-DIOXID ELEKTROKATALITIKUS REDUKCIÓJÁBAN

Karádi Krisztina^{a,b}, Lokesh Kesavan^b, Carita Kvarnström^b

^a*Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport, Szerves Kémiai Tanszék, Kémiai Intézet, Szegedi Tudományegyetem, Szeged, Magyarország*

^b*Materials Chemistry Research Group, Laboratory of Materials Chemistry and Chemical Analysis, Turku University Centre for Materials & Surfaces, Department of Chemistry, University of Turku, Finland*

A szén-dioxid elektrokémiai átalakítása tüzelőanyagokká, illetve hasznosítható vegyianyagokká számos kutatás tárgyát képezi, ugyanis ezzel egyszerre található meg a globális szén-dioxid tartalom csökkentésére, illetve a megújuló energia hatékony tárolására [1-2]. Ez a folyamat újrahasznosítja a szén-dioxidot, lehetővé téve egy közel szén-semleges, zárt rendszerű tüzelőanyagégetési módszert. Így csökkenthető a CO₂-kibocsátás, megakadályozva az üvegházhatású gázok növekvő koncentrációját a légkörben.

Az „időszakos” villamosenergia tárolására a kémiai kötések jelenthetnek megoldást egy stabil és hordozható formában. A szén-dioxid elektrokémiai stabilizálása azonban kinetikai szempontból kihívást jelent, általában nagy túlfeszültséget igényel, tehát az elektrokémiai szén-dioxid redukció hatékonysága nagymértékben függ a katódos elektrokatalizátor aktivitásától és szelektivitásától.

Munkám során amorf szénhordozóra vitt arany és palládium nanorészecskéket szintetizáltam szol-immobilizációs módszerrel. Ezeket a nanorészecskéket alkalmaztam a szén-dioxid elektro-redukciójának katalizátoraként. Aktivitásukat ciklikus voltammetria segítségével vizsgáltam.

[1] S. Solomon, J.S. Daniel, T.J. Sanford, D.M. Murphy, G.-K. Plattner, R. Knutti, P. Friedlingstein, *PNAS* **2010**, (107), 18354–18359.

[2] O. S. Bushuyev, P. De Luna, C. T. Dinh, L. Tao, G. Saur, J. van de Lagemaat, S. O. Kelley, E. H. Sargent, *1 Joule* **2018**, (2), 825–832.

ELLAGSAV ALAPÚ RÉTEGES KETTŐS HIDROXID HIBRIDEK ANTIOXIDÁNS AKTIVITÁSA

Szerlauth Adél^a, Muráth Szabolcs^{a,b}, Sebők Dániel^b, Szilágyi István^{a,b}

^a MTA-SZTE Lendület Biokolloidok Kutatócsoport, Szeged, 6720, Rerrich Béla tér 1.

^b Szegedi Tudományegyetem, Interdiszciplináris Kiválósági Központ, Kémiai Intézet, Szeged, 6720, Rerrich Béla tér 1.

A réteges kettős hidroxidok (LDH) olyan lamellás szerkezetű anyagok, melyek rétegei között anionok helyezkednek el. Anioncserére való képességük lehetőséget biztosít hordozóként való alkalmazásukra, különböző anyagok rétegek közé való beépítésére [1]. Munkánk során ellagsav/réteges kettős hidroxid hibrideket állítottunk elő együttes lecsapásos eljárással, az ellagsav, mint természetben előforduló lipofil polifenolos antioxidáns, vízdoldhatóságának növelése céljából. Az előállítás során a lúgos környezet hatására az ellagsav laktongyűrűi felhasadtak és a rétegek közé a 4,4',5,5',6,6'-hexahidroxidifénsav anionos formája épült be. A mintákat felületi tulajdonságok módosítása céljából különböző szerves oldószerekkel kezeltük. Szerkezetüket porröntgen diffrakciós (PXRD) és infravörös spektroszkópiai (FTIR) mérésekkel vizsgáltuk. A szintézis során beépült antioxidáns mennyiségének spektrofotometriai mérésekkel történő meghatározását követően, a szabad ellagsav és az ellagsav/LDH hibridek antioxidáns aktivitását két széles körben elterjedt teszt segítségével állapítottuk meg. A DPPH-teszt a 2,2-difenil-1-pikrilhidrazil (DPPH) nitrogéngyök, míg a CUPRAC-teszt a Cu(II)-neokuproin komplex antioxidáns hatására történő redukcióján alapul. A reakció következtében végbemenő színváltozást spektrofotometriai módszerrel követtük, majd minden minta esetében meghatároztuk a hatásos koncentrációt, illetve a trolox ekvivalens aktivitást. Az ellagsav hordozóba történő beépítésével javítottuk vízdékonyságát és megállapítottuk, hogy függetlenül attól, hogy a rétegek közé módosult szerkezettel épült be, megmaradt antioxidáns aktivitása. Az antioxidáns tesztek alapján megállapítható továbbá, hogy a szerves oldószerekkel történő kezelés hatására bekövetkező szerkezeti változások javították a minták antioxidáns aktivitását. Összességében kijelenthetjük, hogy sikerült olyan nanohibrideket előállítanunk, melyek potenciálisan alkalmazhatók lehetnek a különböző hatások által kiváltott szabadgyökökkel szembeni védekezésre.

[1] V. Rives, M. Arco, C. Martin; *Applied Clay Science*, **2014** (88-89) 239-269

A kutatást a Magyar Tudományos Akadémia (Lendület 96130) és az Emberi Erőforrások Minisztériuma (20391-3/2018/FEKUSTRAT) támogatta.

ANALITIKAI KÉMIAI SZEKCIÓ II.

HETEROGÉN FOTOKATALIZÁTOROK O₂⁻ GENERÁLÓ KÉPESSÉGÉNEK VIZSGÁLATA ÚJ MÓDSZERREL

Fónagy Orsolya, Szabóné Bárdos Erzsébet, Horváth Ottó, Wafi Abdul, Kocsis Gábor

Pannon Egyetem, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

Számos kutatócsoport foglalkozik heterogén fotokatalizátorok fejlesztésével, melyek aktivitását különböző modellvegyületekkel tesztelik. Az egyes vegyületek esetében a gerjesztést követően keletkező aktív gyökök szerepe eltérő is lehet, ezért a szakirodalmi eredmények nem vagy csak nehezen hasonlíthatók össze. A félvezető katalizátorok gerjesztésekor keletkező aktív részecskék mennyiségének mérése egy egységesebb kép kialakítását segítheti.

Munkánk célja, hogy a kumarin gyökbefogót alkalmazó [1,2], a hidroxilgyökök képződési sebességének mérésére alkalmas eljáráshoz hasonló, egyszerűen kivitelezhető új módszert dolgozzunk ki a keletkező e⁻/O₂⁻-ok mérésére. Az 1,4-benzokinin és származékai hidrokinonokká redukálódnak kételektronos folyamatokban, melyek reverzibilisek [3]. Említett kedvező tulajdonságuk miatt jól alkalmazhatóak elektrontranszfer vegyületként, illetve versengő szuperoxid-gyökanion befogóként gyakran használják az 1,4-benzokinin mellett. A kísérlet eredménye ugyan információt ad a gyökanion bomlási folyamatban betöltött szerepéről, de pontos mennyisége és képződési sebessége nem határozható meg ily módon.

Munkánk során különböző kísérleti körülmények között vizsgáltuk az 1,4-benzokinin közvetlen gyökbefogóként történő alkalmazhatóságát. Megállapítottuk, hogy míg az 1,4-benzokinin csupán a gerjesztés során keletkező elektronok mérésére alkalmas, addig redukációs terméke az 1,4-hidrokinon nagy valószínűséggel alkalmas a keletkező O₂⁻-ok mérésére. A kifejlesztett új módszer alkalmazási lehetőségeit és határait a pH hatásának tanulmányozásával és különböző módosított, hibrid fotokatalizátorok tesztelésével vizsgáltuk.

- [1] K. I. Ishibashi, A. Fujishima, T. Watanabe, K. Hashimoto; *Electrochemistry Communications*, **2000** (2) 207–210
[2] H. Czili, A. Horváth; *Applied Catalysis B: Environmental*, **2008** (81) 295–302
[3] É. Józsa, M. Purgel, M. Bihari, P. P. Fehér, G. Sustyák, B. Várnagy, V. Kiss, E. Ladó, K. Ósz; *New Journal of Chemistry*, **2014** (38) 588-597

Zsirkáné Fónagy Orsolya kutatási munkája az Innovációs és technológiai minisztérium ÚNKP-19-3 kódszámú új Nemzeti Kiválósági Programjának szakmai támogatásával készült. A kutatás további anyagi háttérét az EFOP-3.6.1-16-2016-00015 pályázat biztosította.

TABLETTÁK MINŐSÉGELLENŐRZÉSÉRE SZOLGÁLÓ GÉPI LÁTÁST ALKALMAZÓ RENDSZER FEJLESZTÉSE

Mészáros Lilla Alexandra^a, Galata Dorián László^a, Dr. Nagy Zsombor Kristóf^a

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

A gyógyszerhatóságok az iparágban a hagyományos szakaszos technológiákról a folyamatos technológiák irányába történő paradigmaváltási folyamattal megvalósuló innovációt, modernizációt, fejlesztést a szabályozási környezet átalakításával igyekeznek segíteni. Az elmúlt évtizedben az ezen a területen megjelent ajánlásaikkal, a folyamatfigyelő és elemző rendszerek, valamint a termékbe tervezett minőség koncepciójával a gyártási folyamatok nyomon követését, adatok gyűjtését, majd többváltozós adatelemzési módszerekkel történő elemzését, a folyamat megértését, szabályozását teszik lehetővé. Ezzel összhangban támogatják az új analitikai eszközök fejlesztését, melyek segítségével a termékbe tervezett minőség koncepciója megvalósítható. A gépi látást alkalmazó rendszerek forradalmian új megoldásokat biztosíthatnak a jelenleg alkalmazott analitikai rendszerek fejlesztési irányában és új rendszerek megjelenését is magukkal hozhatják. A gépi látást alkalmazó rendszerek, a képfeldolgozás és a képelemzés széles körben felhasználhatóak, több iparágban is találhatunk publikációkat sikeres alkalmazásukra.

Munkám célja bevonat nélküli, színes hatóanyagot tartalmazó tabletták minőségellenőrzésére szolgáló, folyamatos technológiák alkalmazását támogató gépi látási rendszer fejlesztése.

Az alkalmazott gyógyszerformák jelentős részét a tabletták képviselik, így vizsgálatukra alkalmas minőségellenőrzési módszerek, rendszerek fejlesztése jelenleg is releváns területet jelent. A tabletták fizikai tulajdonságai közül fontos a törési szilárdság, melynek értéke meghatározza a bevonási és csomagolási lépések kimenetelét. Ezen paraméter összefüggésbe hozható a tablettázási folyamat során alkalmazott préserővel. A préserő vizsgálatához RGB képek készítését követően waveletek alkalmazásával történő, többváltozós textúra elemző algoritmust fejlesztettem, majd a kapott eredményeket közeli infravörös spektroszkópiai módszer eredményeivel hasonlítottam össze. A tabletták további fontos tulajdonsága a hatóanyagtartalom és annak egységessége. A tablettákról történő RGB képek készítését követően a színes hatóanyag koncentrációjának meghatározását az algoritmus az alkalmazott szintér hisztogramja alapján végzi. A fejlesztett rendszerrel kapott eredményeket szintén közeli infravörös spektroszkópiai módszer eredményeivel hasonlítottam össze.

Az általam fejlesztett, tabletták minőségellenőrzésére szolgáló, gépi látást alkalmazó rendszer egy új, egyszerűbb, olcsóbb alternatívát nyújthat az ezen a területen jelenleg alkalmazott mérés technikai eszközökkel és módszerekkel szemben.

DIZÁJNER DROGOK ÉS METABOLITJAIK AZ IGAZSÁGÜGYI GYAKORLATBAN

**Körmöczi Tímea^a, Kovács Orsolya^b, Sija Éva^c, Hunya Ákos^d, Reza Samavati^b, Gáspár Róbert^b,
Institőr László^c, Ilisz István^a, Berkecz Róbert^a**

^aSZTE GYTK Gyógyszeranalitikai Intézet, 6720 Szeged, Somogyi utca 4.

^bSZTE ÁOK Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet, 6721 Szeged, Dóm tér 12.

^cSZTE ÁOK Igazságügyi Orvostani Intézet, 6724 Szeged, Kossuth Lajos sgt. 40.

^dMTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont, Biokémiai Intézet, 6726 Szeged, Temesvári krt 62.

Komoly aggodalomra ad okot napjainkban, főleg a fiatalok körében népszerű herbál, Spice, biofű, műfű, füstölő és legális fű néven terjedő szerek. Ezek az interneten beszerezhető, a marihuánához nagyon hasonló növényi törmelékek rendszerint szintetikus kannabinoidokat tartalmaznak. A szintetikus kannabinoidok a dizájner drogok egyik jelentős csoportjába tartoznak, melyek a marihuána fő pszichoaktív anyagához, a tetrahidrokannabinolhoz hasonlóan a CB₁ és CB₂ kannabinoid receptorokon fejtik ki hatásukat.

Intézetünkben 2015 óta történik a rendőrségi valamint klinikai vér és vizeletminták analízise. A szintetikus kannabinoid fogyasztást az anyamolekula LC-MS/MS technikával történő azonosításával végezzük. A szintetikus kannabinoidok gyors metabolizmusának következtében, több esetben is a fogyasztást bevallók között nem sikerült az anyamolekula detektálása. Az anyamolekulák mellett a főbb metabolitok analízisével megbízhatóbbá válna a szintetikus kannabinoidok használatának igazolása. A metabolikus folyamatok megismerésére több módszer is rendelkezésünkre áll, úgy mint az *in vitro* (májmikroszóma, májsejt), *in vivo* (állatkísérletek, humán vizelet és vérminták) valamint *ex vivo* (májperfúzió) kísérletek.

Munkánk fő céljai között szerepel olyan *in vitro*, *ex vivo* és *in vivo* vizsgálati módszerek kidolgozása és komplex összehasonlítása, amelyek alkalmasak szintetikus kannabinoidok metabolizmusának vizsgálatára, illetve a képződő metabolitok azonosítására alkalmas analitikai módszerek kifejlesztése és alkalmazása. Vizsgálatainkhoz 2018-ban legnépszerűbb CUMYL-PeGaCLONE szintetikus kannabinoidot választottuk ki modell vegyületnek. A májmikroszómás kísérletek alkalmasak voltak a fázis I metabolitok tanulmányozására, a májsejtes vizsgálatok a metabolitok képzése mellett információt nyújtottak a CUMYL-PeGaCLONE májkárosító hatásáról. A patkány májperfúziós rendszerrel a metabolitok képződésének vizsgálata mellett megismertük mind a CUMYL-PeGaCLONE mind főbb metabolitjainak koncentrációjának időbeni változását. Végezetül a kifejlesztett *in vitro*, *ex vivo* módszerek eredményeit összevettük humán vizeletminták metabolomikai eredményeivel.

A kutatás az EFOP-3.6.1-16.2016.-00008 pályázat keretén belül valósult meg.

KÉTFÁZISÚ KIOLDÓDÁSVIZSGÁLATI MÓDSZER FEJLESZTÉSE EGY ROSSZ VÍZOLDHATÓSÁGÚ HATÓANYAG KÜLÖNBÖZŐ KRISZTÁLYMÓDOSULATAINAK EGYIDEJŰ KIOLDÓDÁS ÉS FELSZÍVÓDÁS VIZSGÁLATÁHOZ

Kádár Szabina^a, Katona Miklós^b, Jaksáné Borbás Enikő^a

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

^b*Egis Gyógyszergyár Zrt, Készítmény analitikai fejlesztési laboratórium 3, 1106 Budapest, Keresztúri út 30-38.*

A gyógyszeriparban kioldódás vizsgálatokat minőségellenőrzési okokból, illetve a várható biohasznosulás előrejelzésére alkalmazzák. A minőségellenőrzési vizsgálatok során alkalmazott módszerek a gyógyszerhatóságok által jól szabályozott, egyszerű, standard módszerek. Sok esetben azonban nem alkalmasak a biohasznosulás előrejelzésére, amire azonban a gyógyszerkészítmények fejlesztése során nagy szükség van. [1]

Kutatómunkánk céljaként ezért a biohasznosulás előrejelzésére alkalmas kétfázisú kioldódás vizsgálati módszer fejlesztését tűztük ki, amely folyamat során a készítmény először feloldódik a kioldóközegben, majd a hatóanyag megoszlik a vizes és a szerves fázis között, ezzel modellezve a sejtmembránok lipofil jellegét, amelyen keresztül a gyógyszer felszívódik.

Módszerfejlesztésünk során egy USP II-es kioldókészüléket kapcsoltunk össze egy USP IV-es átfolyócellás kioldókészülékkel, ezzel egy zárt rendszert létrehozva. Szükséges volt a közeg térfogatának és pH értékének, valamint a keverés megvalósításának és a keverési sebesség optimalizálására, ezen felül a szerves fázis és az áramlási sebesség megfelelő megválasztására a kioldódás és felszívódás egyidejű vizsgálatához. Ezen felül megvalósítottuk egy rossz vízoldhatóságú modellhatóanyag oldhatóságának javítását polimorf átalakítással, sóképzéssel és amorf forma előállításával, továbbá ezek gyógyszerkészítménnyé való formálását. A különböző módosulatokat azonosítottuk differenciál pásztázó kalorimetriával, röntgendiffrakcióval és polármikroszkóp segítségével.

A fejlesztett kétfázisú kioldódási módszerrel az általunk előállított végső gyógyszerformákat vizsgáltuk, mely során kapott eredményeket várható biohasznosulás szempontjából összehasonlítottuk.

[1] A. Dahan, J. M. Miller, *AAPS J.*, **2012**, 14 (2), 244–251

A munka a FIEK_16-1-2016-0007 számú projekt keretén belül a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból biztosított támogatással, a "Felsőoktatási és Ipari Együttműködési Központ – Kutatási infrastruktúra fejlesztése – FIEK_16" pályázati program finanszírozásában valósult meg.

MÉRETKIZÁRÁSOS MEMBRÁN MINT A LIPIDMEMBRÁNOK ALTERNATÍVÁJA

**Tózsér Petra^a, Borbás Enikő^a, Sinkó Bálint^b, Takácsné Novák Krisztina^c, Völgyi Gergely^c,
Konstantin Tsinman^b, Marosi György^a, Nagy Zsombor Kristóf^a**

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

^b *Pion Inc., Billerica MA, USA*

^c *Semmelweis Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Intézet, 1092 Budapest, Hőgyes Endre u. 7-9*

A gyógyszer technológia kiemelkedően fontos kihívásainak egyike a BCS II. osztályba sorolható rossz vízoldhatóságú, de jó permeabilitású hatóanyagmolekulák kioldódásának javítása és így módon a biohasznosulásuk növelése. A gyógyszerkönyv mindössze a kioldódás vizsgálatok elvégzését írja elő, melyből azonban a hatóanyagok biohasznosulására vonatkozóan nem vonhatunk le egyértelmű következtetéseket [1]. A formulációs segédanyagok ugyanis növelni vagy csökkenteni egyaránt képesek a biológiai membránokon keresztül történő hatóanyag-transzportot. Ezeket a segédanyag általi hatásokat eddig költséges és érzékeny lipid membránok segítségével vizsgálták. Kutatásunk során egyszerűbb, méretkizárásos membrán segítségével vizsgáltuk a gyógyszerformulációk kioldódását és szimultán permeációját.

Munkánk során egy vízben rosszul oldódó vérnyomáscsökkentő hatóanyagot, a karvedilolt választottuk modell hatóanyagként, melyet oldószeres elektrosztatikus szálképzés segítségével formuláltunk. Két formulációs célra gyakorta használt polimert (egy polivinil-pirrolidon származékot és Soluplust) alkalmazva két különböző szálképzett amorf szilárd diszperziót sikerült előállítanunk, melyeket szimultán kioldódás-felszívódás vizsgálatoknak vetettünk alá.

A mérési eredmények és a membrántranszport fizikai kémiai levezetése egyértelműen rámutattak arra, hogy bár a méretkizárásos és a lipidmembránon keresztüli transzport elve meglehetősen eltérő, a folyamatok hajtóereje megegyezik segédanyagok jelenlétében.

[1] S. Suarez-Sharp, M. Li; J. Duan; H. Shah; P. Seo; *AAPS Journal*, **2016**, 18 (6)

A munka a FIEK_16-1-2016-0007 számú projekt keretén belül a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból biztosított támogatással, a "Felsőoktatási és Ipari Együttműködési Központ – Kutatási infrastruktúra fejlesztése – FIEK_16" pályázati program finanszírozásában valósult meg.

KELÁTKÉPZŐK INHIBÍCIÓS HATÁSA GIPSZ KRISTÁLYOSODÁSÁRA

Ziegenheim Szilveszter^a, Sztégura Alex^a, Pálinkó István^b Sipos Pál^a

^aSzegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 6720 Szeged Dóm Tér 7.

^bSzegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék, 6720 Szeged Dóm Tér 8.

Napjainkban sok ipari folyamat során okoz komoly problémákat különböző szilárd anyagok kicsapódása a felhasznált folyadékokból. Olajfűrészeknél mind a fűrészes közeg kapillárisaiban, mind a fűrészeiken kicsapódva nehezíti az eljárást; hőcserélő felületeken kicsapódva erősen csökkentik geotermikus energiát felhasználó folyamatok hatásfokát; szintézisek során melléktermékként keletkezve megnehezítik a tiszta termék előállítását (foszforsavgyártás). Az egyik leggyakoribb ilyen könnyen kristályosodó anyag a $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (gipsz), emiatt ma is fontos kutatások tárgyát képezi a kristályosodásának inhibíciója.

Korábban sokféle anyagot kipróbáltak potenciális inhibitoroként a gipsz kristályosodási reakciójában, ezek közül a karboxilcsoporttal rendelkező szerves ligandumok hatékonyak bizonyultak. Mi a kutatásaink során több karboxilcsoporttal rendelkező kelátképző ligandumok (1,2-etilén-diamin-tetraecetsav – EDTA; 1,3-propilén-diamin-tetraecetsav – 1,3-PDTA; 1,6-diamino-hexán-tetraecetsav – 1,6-HDTA; etilén-glikol-bis(2-aminoetiléter)-tetraecetsav – EGTA) inhibíciós képességeit vizsgáltuk meg különböző körülmények között. A reakciók lefolyását *in-situ* követtük a vezetőképesség mérésével. Megvizsgáltuk a pH változtatásának hatásait a reakcióra, tanulmányoztuk a szilárd anyag szerkezetében (porröntgen diffraktometria – XRD) és morfológiájában (pásztázó elektronmikroszkóp – SEM) bekövetkezett változásokat, valamint felderítettük az inhibitoraink sorsát a reakció után (felülíró vizsgálata UV-spektroszkópiával; szilárd anyag tanulmányozása IR spektroszkópiával).

„AZ INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI MINISZTERIUM ÚNKP-19-3-SZTE-336 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROG-RAMJÁNAK SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.”



A 2019. ÉVI KÉMIAI ELŐADÓI NAPOKAT TÁMOGATTÁK:

**MTA Szegedi Akadémiai
Bizottság**



**Magyar Kémikusok
Egyesülete**



**Magyar Kémikusok
Egyesülete
Csongrád Megyei
Csoport**

