

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

XLVI. KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK

Programfüzet



Szeged, 2023. október 17-19.

*Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza
6720 Szeged, Somogyi u. 7 (103-104 Díszterem)*

Organized by the Csongrád county sub-division of Hungarian
Chemical Society and the Hungarian Chemical Society

XLVI. CHEMISTRY LECTURES

Program book

Szeged, 17-19. October 2023.

*Szervezők: Karádi Krisztina és V. Árok Zsófia
Organizers: Krisztina Karádi and Zsófia V. Árok*

ÁTTEKINTŐ PROGRAM / SHORT PROGRAM

2023. október 17. kedd / 17 October 2023 Tuesday

- 09.30 – Regisztráció / Registration
10.30 – 11.00 Megnyitó
Prof. Sipos Pál, egyetemi tanár
A Magyar Kémikusok Egyesülete
Csongrád Megyei Csoportjának elnöke
Nívódíjak átadása
Dr. Janáky Csaba, egyetemi docens
Magyar Kémikusok Egyesülete
11.00 – 12.00 Plenáris előadás
Előadó: Dr. Varga Gábor, egyetemi tanársegéd
12.00 – 13.00 Ebédszünet
13.00 – 14.15 Nívódíjas előadások szekciója I. *Elnök: Dr. Dömötör Orsolya*, egyetemi adjunktus
14.15 – 14.30 Kávészünet
14.30 – 15.45 Nívódíjas előadások szekciója II. *Elnök: Dr. Endrődi Balázs*, egyetemi adjunktus
15.45 – 16.00 Kávészünet
16.00 – 17.30 Biochemistry/Biokémia szekció *Elnök: Halmágyi Tibor Gergő*, tudományos munkatárs
18.00 – 21.00 Konferenciavacsora (*Hági Udvar és Étterem*, 6720 Szeged, Kelemen László utca 3.)
Conference dinner (*“Hági Udvar és Étterem”*, 6720 Szeged, Kelemen László street 3.)

2023. október 18. szerda / 18 October 2023 Wednesday

- 09.15 – Regisztráció / Registration
09.45 – 11.00 Gyógyszerészeti kémia szekció *Elnök: Dr. Dobó Dorina Gabriella*, egyetemi adjunktus
11.00 – 11.15 Kávészünet
11.15 – 12.15 Anyagtudomány szekció I. *Elnök: Dr. Szabados Márton*, tudományos munkatárs
12.15 – 12.45 Ebédszünet
12.45 – 13.45 Gyógyszeranalitikai kémia szekció *Elnök: Dr. Körmöczi Tímea*, tudományos munkatárs
13.45 – 14.00 Kávészünet
14.00 – 15.00 Anyagtudomány szekció II. *Elnök: Dr. Varga Gábor*, egyetemi tanársegéd
15.05 – 16.00 Látogatás a szegedi Új Zsinagógába, 6722 Szeged, Jósika utca 10.
Visiting the Szeged New Synagogue, 6722 Szeged, Jósika street 10.

2023. október 19. csütörtök / 19 October 2023 Thursday

- 08.30 – Regisztráció / Registration
09.00 – 10.00 Orvosi kémia szekció *Elnök: Dr. Lőrinczi Bálint*, egyetemi tanársegéd
10.00 – 10.15 Kávészünet
10.15 – 11.45 Szerves kémia szekció *Elnök: Tolnai Balázs*, igazságügyi vegyészszerkesztő
11.45 – 12.15 Ebédszünet
12.15 – 13.30 Fenntartható kémia/ Sustainable chemistry szekció *Elnök: Dr. Schusztér Gábor*, adjunktus
13.30 – 13.45 Kávészünet
13.45 – 14.45 Anyagtudomány szekció III. *Elnök: Dr. Kutus Bence*, tudományos munkatárs
14.45 – 15.00 Kávészünet
15.00 – 16.30 Fizikai kémia szekció *Elnök: Dr. Samu Gergely Ferenc*, tudományos munkatárs

KÖZÖSSÉGI PROGRAMOK



Konferenciavacsora

2023. OKTÓBER 17.

KEDD, 18:00–21:00

HÁGI UDVAR ÉS ÉTTEREM

6720 SZEGED, KELEMEN LÁSZLÓ UTCA 3.



Zsinagógagalátogatás

2023. OKTÓBER 18.

SZERDA, 15:05–16:00

KÖZÖS INDULÁS A KONFERENCIA HELYSZÍNÉTŐL

SOCIAL PROGRAM



Conference dinner

17 OCTOBER 2023

TUESDAY, 18:00–21:00

HÁGI GARDEN AND RESTAURANT

6720 SZEGED, KELEMEN LÁSZLÓ STREET 3.



Visiting the New Synagogue

18 OCTOBER 2023

WEDNESDAY, 15:05–16:00

ORGANIZED DEPARTURE FROM THE CONFERENCE VENUE

**A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE ÁLTAL
NÍVÓDÍJJAL KITÜNTETETT DIPLOMADOLGOZATOK
2023**

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM

KISS ETELKA:

Kumarinvázis fotokapcsoló gerjesztett állapotú folyamatainak vizsgálata

LŐRINCZ BALÁZS:

Szupramolekuláris és katalitikus kémiában előforduló bonyolult molekuláris kölcsönhatások pontos modellezése

DEBRECENI EGYETEM

BENEDEK MÁTÉ:

Kopolimerek karakterizálása gél permeációs kromatográfia és neurális háló alkalmazásával

MAKAI TÍMEA KAMILLA:

A tehetséggondozás lehetőségei a kémia- és matematikatanítás szempontjából

SZABÓ DÁVID RUBEN:

Monoklonális antitestek elektroporlasztásos ionizációs tömegspektrometriával kapott spektrumainak vizsgálata

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

FEHÉRVÁRI ESZTER:

Humán peptidil-arginin-deimináz enzimek autocitrullinációjának vizsgálata tömegspektrometriával

LACZKÓ GERGELY:

Computational Study of Base-Catalyzed Thioester Isomerizations

ZSIGNÁR-NAGY BARNABÁS:

Bifenilén alapú diaril-etén fotokapcsolók előállítása és vizsgálata

PANNON EGYETEM

TÓTH ELIZA:

Átmenetifém-oxid tartalmú halloysit nanokompozit fotokatalizátorok fejlesztése

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

KAJNER GYULA:

Szerves és szervetlen részecske diszperziók ICP-MS vizsgálatára alkalmas 3D nyomtatott mintabeviteli rendszer fejlesztése és alkalmazása

RÉSZLETES PROGRAM / DETAILED PROGRAM

2023. október 17. kedd / 17 October 2023 Tuesday

- 09.30 – Regisztráció / Registration**
10.30 – 11.00 Megnyitó
Prof. Sipos Pál, egyetemi tanár
A Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportjának elnöke
Nívódíjak átadása
Dr. Janáky Csaba, egyetemi docens
Magyar Kémikusok Egyesülete
- 11.00 – 12.00 Plenáris előadás**
AUSZTRÁLIÁBÓL JÖTTEM – EGY MARIE CURIE ÖSZTÖNDÍJ TÖRTÉNETE
Előadó: Dr. Varga Gábor, egyetemi tanársegéd
- 12.00 – 13.00 Ebédszünet (Díszterem előtti folyosó)**
- 13.00 – 14.15 Nívódíjas előadások szekciója I.**
Elnök: Dr. Dömötör Orsolya, egyetemi adjunktus
- 13.00 – 13.15 Humán peptidil-arginin-deimináz enzimek autocitrullinációjának vizsgálata tömegspektrometriával
Előadó: Fehérvári Eszter, PhD hallgató
- 13.15 – 13.30 Szerves és szervetlen részecske diszperziók ICP-MS vizsgálatára alkalmas 3D nyomtatott mintabeviteli rendszer fejlesztése és alkalmazása
Előadó: Kajner Gyula, PhD hallgató
- 13.30 – 13.45 Bifenilén alapú diaril-etén fotokapcsolók előállítás és vizsgálata
Előadó: Zsignár-Nagy Barnabás, PhD hallgató
- 13.45 – 14.00 Átmenetifém-oxid tartalmú halloysit nanokompozit fotokatalizátorok fejlesztése
Előadó: Tóth Eliza, PhD hallgató
- 14.00 – 14.15 Szupramolekuláris és katalitikus kémiában előforduló bonyolult molekuláris kölcsönhatások pontos modellezése
Előadó: Lőrincz Balázs, PhD hallgató
- 14.15 – 14.30 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó)**
- 14.30 – 15.45 Nívódíjas előadások szekciója II.**
Elnök: Dr. Endrődi Balázs, egyetemi adjunktus
- 14.30 – 14.45 Monoklonális antitestek elektroporlasztásos ionizációs tömegspektrometriával kapott spektrumainak vizsgálata
Előadó: Szabó Dávid Ruben, PhD hallgató
- 14.45 – 15.00 A tehetséggondozás lehetőségei a kémia- és matematikatanítás szempontjából
Előadó: Makai Tímea Kamilla, középiskolai oktató
- 15.00 – 15.15 Kumarinvázis fotokapcsoló gerjesztett állapotú folyamatainak vizsgálata
Előadó: Kiss Etelka, PhD hallgató
- 15.15 – 15.30 Kopolimerek karakterizálása gél permeációs kromatográfia és neurális háló alkalmazásával
Előadó: Benedek Máté Benjámin, PhD hallgató
- 15.30 – 15.45 Computational study of base-catalyzed thioester isomerizations
Presenter: Laczkó Gergely, PhD student

- 15.45 – 16.00** Kávészünet (Díszterem előtti folyosó)
- 16.00 – 17.30** **Biochemistry/Biokémia szekció**
Elnök: Halmágyi Tibor Gergő, tudományos munkatárs
- 16.00 – 16.15 Polymeric magnetic nanoparticles for mitomycin delivery: synthesis, characterization, and in vitro drug release
Presenter: Keristina Wagdi Kamil Amin, PhD student
- 16.15 – 16.30 Development of corticosteroid-loaded liposomes
Presenter: Budavári Bálint, PhD student
- 16.30 – 16.45 The interaction between mucin and poly(amino acid)s with controlled cationic group content
Presenter: Stankovits József Gergely, PhD student
- 16.45 – 17.00 A mukoadhézió értelmezése hidrogél felszínen
Előadó: Szayly Kata, Bsc hallgató
- 17.00 – 17.15 Elnyújtott hatóanyag-leadás poliszukcinimid és poli(vinil-pirrolidon) alapú szálas mátrixokból
Előadó: Mihalovics Bence, Msc hallgató
- 17.15 – 17.30 Antioxidáns és proteáz aktivitással rendelkező nanokompozitok fejlesztése
Előadó: Kónya Zsuzsanna, Bsc hallgató
- 18.00 – 21.00** Konferenciavacsora (*Hági Udvar és Étterem, 6720 Szeged, Kelemen László utca 3.*)

2023. október 18. szerda / 18 October 2023 Wednesday

- 09.15 –** **Regisztráció / Registration**
- 09.45 – 11.00** **Gyógyszerészeti kémia szekció**
Elnök: Dr. Dobó Dorina Gabriella, egyetemi adjunktus
- 09.45 – 10.00 2-Acetil-piridin-aminoguanidin Schiff-bázisok és fémkomplexeik oldategyensúlyi és redoxi tulajdonságaik
Előadó: Gátszegi Gerda Tímea, Msc hallgató
- 10.00 – 10.15 Potenciális STAT5b inhibitorok tervezése és szintézise
Előadó: Péczka Nikolett, PhD hallgató
- 10.15 – 10.30 AKR1C enzimcsalád biológiai funkciója és inhibitorai
Előadó: Csengeri Ágnes, biológia-kémia szakos hallgató
- 10.30 – 10.45 Apremilast gyógyszerhatóanyag-szintézis kulcsfontosságú intermedierének rezolválása
Előadó: Nguyen Thuy Hong Ha, PhD hallgató
- 10.45 – 11.00 2-Azidopridin és rokon vegyületeinek gyors és biztonságos áramlások kémiai szintézise és tovább alakítása
Előadó: Szemesi Péter, PhD hallgató
- 11.00 – 11.15** Kávészünet (Díszterem előtti folyosó)
- 11.15 – 12.15** **Anyagtudomány szekció I.**
Elnök: Dr. Szabados Márton, tudományos munkatárs
- 11.15 – 11.30 Pszeudo-perovszkitok optoelektronikai tulajdonságainak finomhangolása halogéncserével
Előadó: Hajdu Cintia, PhD hallgató

- 11.30 – 11.45 Üvegszálak regenerálása üvegszálak kompozitból hidrotermális bontással
Előadó: Képes Bence, Bsc hallgató
- 11.45 – 12.00 Funkcionális molekulák vizsgálata pumpa-szonda szórási kísérletekkel ultragyors időskálán
Előadó: Mikeházi Antal János, PhD hallgató
- 12.00 – 12.15 Radioaktív hulladékok kondicionálására alkalmas kötőanyagok és kompozitjaik NMR relaxometriás vizsgálata
Előadó: Kertész Tamás Péter, Msc hallgató
- 12.15 – 12.45 Ebédszünet (Díszterem előtti folyosó)
- 12.45 – 13.45 **Gyógyszeranalitikai kémia szekció**
Elnök: Dr. Körmöczy Tímea, tudományos munkatárs
- 12.45 – 13.00 Filmtabletták minőségellenőrzése közeli infravörös és Raman-spektroszkópia segítségével
Előadó: Szabó Bence, Msc hallgató
- 13.00 – 13.15 UV képalkotáson alapuló gépi látási rendszer alkalmazása tabletták vizsgálatára
Előadó: Mészáros Lilla Alexandra, PhD hallgató
- 13.15 – 13.30 Aripiprazol tartalmú készítmények bioekvivalencia vizsgálatának predikciója kioldódás-felszívódás alapon
Előadó: Kádár Szabina, PhD hallgató
- 13.30 – 13.45 Felületaktív anyagok és pH-módosító segédanyagok hatása a pimobendán kioldódására és felszívódására
Előadó: Tózsér Petra, PhD hallgató
- 13.45 – 14.00 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó)
- 14.00 – 15.00 **Anyagtudomány szekció II.**
Elnök: Dr. Varga Gábor, egyetemi tanársegéd
- 14.00 – 14.15 Az aszfaltének és a tárolóközetek szerepe a kőolajemulziók stabilitásában
Előadó: Ördög Tibor István, Technológia transzfer szenior szakértő
- 14.15 – 14.30 Polimer adalékok szerepének vizsgálata elektrokémiai szén-monoxid redukcióban
Előadó: Galbicsek Noémi Vanda, Bsc hallgató
- 14.30 – 14.45 Hangolható szén-monoxid redukciós szelektivitás polianilin/réz nanokompozit elektrokatalizátorokon
Előadó: Drágity Deján, Bsc hallgató
- 14.45 – 15.00 Antioxidáns kompozitok előállítása mangán-oxid és cérium-oxid nanozyme-ok kontrollált heteroaggregációjával
Előadó: Viczián Dániel, Bsc hallgató
- 15.05 – 16.00 Látogatás a szegedi Új Zsinagógába (közös indulás a SZAB székházból)

2023. október 19. csütörtök / 19 October 2023 Thursday

08.30 – Regisztráció / Registration

09.00 – 10.00 Orvosi kémia szekció

Elnök: Dr. Lőrinczi Bálint, egyetemi tanársegéd

09.00 – 09.15 A jövő sebfedői? - Poliszukcinimid és só keverékéből háromdimenziós, nanoszálak struktúra előállítása

Előadó: Nanys Mónika, Msc hallgató

09.15 – 09.30 Poliszukcinimid/szervetlen só kompozit szálak struktúrák optimalizálása és potenciális orvosi alkalmazhatósága

Előadó: Pálos Veronika, PhD hallgató

09.30 – 09.45 Fertőtlenítő hatású PVA szövetek előállítása

Előadó: Kiss Eszter, PhD hallgató

09.45 – 10.00 Fém tartalmú nanorészecskék antibakteriális és citotoxikus hatása, irodalmi összefoglalás

Előadó: Halmóczy Sarolta, PhD hallgató

10.00 – 10.15 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó)

10.15 – 11.45 Szerves kémia szekció

Elnök: Tolnai Balázs, igazságügyi vegyészszerelő

10.15 – 10.30 Fotokatalitikus rendszerek fejlesztése szén-szén kapcsolások kivitelezésére

Előadó: Gémes Gergő, Bsc hallgató

10.30 – 10.45 Aza-BODIPY típusú fényérzékenyítő anyagok szintézise

Előadó: Hlogyik Tamás, PhD hallgató

10.45 – 11.00 Biológiailag aktív kannabigerol származékok előállítása Mannich reakcióval

Előadó: Tóth Gergely, hallgató

11.00 – 11.15 Antitumor hatású protoflavon-indol hibrid vegyületek előállítása és vizsgálata

Előadó: Girst Gábor, tudományos segédmunkatárs

11.15 – 11.30 [1,2,4]triazolo[1,5-a]pirimidin vázas GABAB pozitív allosztérikus modulátorok szintézise

Előadó: Petró József Levente, kutató-fejlesztő vegyész, PhD hallgató

11.30 – 11.45 Mikrotálca rendszeren alapuló, nagy áteresztőképességű enantiomerszeparációs eljárás kidolgozása

Előadó: Jávorski Bálint, Msc hallgató

11.45 – 12.15 Ebédészünet (Díszterem előtti folyosó)

12.15 – 13.30 Fenntartható kémia/Sustainable chemistry szekció

Elnök: Dr. Schuster Gábor, adjunktus

12.15 – 12.30 Perszulfát-ionok hatása a ZnO heterogén fotokatalitikus aktivitására trimetoprim bontása során

Előadó: Veres Bence, PhD hallgató

12.30 – 12.45 A szén-dioxid elektrokémiai átalakítását befolyásoló paraméterek rész nélküli elektrolizáló cellában

Előadó: Samu Angelika Anita, PhD hallgató

- 12.45 – 13.00 Toxikus vegyületek képződése és bomlása vízkezelési eljárásokban: citromsav klórozása
Előadó: Angyal Dávid, PhD hallgató
- 13.00 – 13.15 The effect of single crystal TiO₂/perovskite band alignment on the kinetics of electron extraction
Presenter: Chen Xiangtian, PhD student
- 13.15 – 13.30 Photoelectrochemical CO₂ reduction on Au-decorated Sb₂Se₃ photocathodes
Presenter: John Mark Christian Dela Cruz, PhD student
- 13.30 – 13.35 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó)
- 13.45 – 14.45 **Anyagtudomány szekció III.**
Elnök: Dr. Kutus Bence, tudományos munkatárs
- 13.45 – 14.00 Poliimid aerogélek hidratációs mechanizmusának vizsgálata
Előadó: Ecsédi Bertold, Bsc hallgató
- 14.00 – 14.15 Polikationos nanoszálak rendszerek fejlesztése elektrosztatikus szálhúzás technikával
Előadó: Takács Ádám, Msc hallgató
- 14.15 – 14.30 Az uranil kation és a réteges kettős hidroxidok közötti kölcsönhatások vizsgálata
Előadó: Péter Tamás, Msc hallgató
- 14.30 – 14.45 Polietilén stabilizálása természetes eredetű antioxidánsokkal
Előadó: Takács Kata, PhD hallgató
- 14.45 – 15.00 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó)
- 15.00 – 16.30 **Fizikai kémia szekció**
Elnök: Dr. Samu Gergely Ferenc, tudományos munkatárs
- 15.00 – 15.15 Kitozán oszcillátorok szinkronizációja
Előadó: Gárdi Bálint, Bsc hallgató
- 15.15 – 15.30 Kalcium-karbonát képződésének tér- és időbeli jellemzése mikrofluidikai reaktorban
Előadó: Ádám Mária Rebeka, Bsc hallgató
- 15.30 – 15.45 Szén-dioxid redukcióval párosított glicerinnal oxidáció folyamatos áramlásos elektrolizáló cellában
Előadó: Szirmai Adrienn, hallgató
- 15.45 – 16.00 Fotoelektrokémiai glicerinnal oxidációs folyamatok nagy áramsűrűségeken
Előadó: Fekete Dávid, Bsc hallgató
- 16.00 – 16.15 Ritkaföldfém-szilikát csapadékcsövek áramlásvezérelt szintézise és jellemzése
Előadó: Farkas Panna, Msc hallgató
- 16.15 – 16.30 A Cl + CH₃CN reakció mechanizmusainak és dinamikájának elméleti modellezése
Előadó: Tóth Petra, Msc hallgató

ABSZTRAKTFÜZET

-

BOOK OF ABSTRACTS

PLENÁRIS ELŐADÁS

AUSZTRÁLIÁBÓL JÖTTEM – EGY MARIE CURIE ÖSZTÖNDÍJ TÖRTÉNETE

Varga Gábor

Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék



„Menni vagy nem menni?” irodalmi áthallással átítatott eldöntött kérdés a fiatal kutatók életében. Aki akadémiai pályára készül valójában a következő kérdést kell, hogy megfogalmazza: Milyen lehetőségei vannak egy frissen végzett fiatal kutatónak arra, hogy külföldi tapasztalatot szerezzen? Ez viszont egy lényegesen összetettebb kérdés és sajnálatos módon a Magyarországon posztgraduális/graduális képzésben résztvevő hallgatók komoly információhiányban szenvednek ezzel kapcsolatban. Ez az információhiány viszont oda vezet, hogy a karriertervezés, ami tőlünk nyugatabbra lényegesen jobban és tudatosabban működik, már az első lépésekben kútba esik/csorbát szenved és egy újabb területen kerülnek versenyhátrányba a magyarországi fiatal kutatók.

A nemzetközi mobilitási pályázatok és a fiatal kutatók számára kiírt ösztöndíjak kulcsfontosságú szerepet töltenek be ebben a bizonyos karrier tervezésében. Az előadás során a saját Marie Curie (MSCA-IF-GF) projektmen keresztül mutatom be, hogyan juthat el egy magyarországi kutató egy jó ötlettel oda, hogy az egyik legkompetitívebb Európai Unió mobilitási ösztöndíj elnyerésével a világ egyik TOP 50 egyeteme közé sorolt intézetben kutathasson. Pontról-pontra bemutatom, hogy milyen buktatókkal és nehézségekkel kell(ett) megküzdennem a projekttervezés, pályázás és a kivitelezés különböző fázisaiban. A fókuszban kivételesen nem feltétlenül csak a szakmai kérdések fognak állni, hiszen egy projekt emberi oldala legalább annyi kihívást tartogathat.

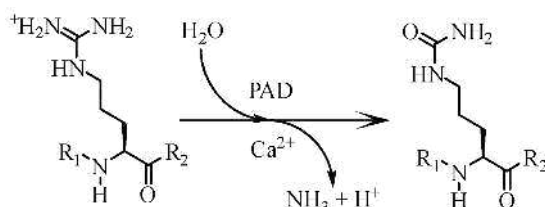
NÍVÓDÍJAS ELŐADÁSOK SZEKCIÓJA I.

Humán peptidil-arginin-deimináz enzimek autocitrullinációjának vizsgálata tömegspektrometriával

Fehárvári Eszter^a, Schlosser Gitta^a, Papp Dávid^a

^aMTA-ELTE Lendület Ionmobilitás-tömegspektrometria Kutatócsoport, 1117 Budapest, Pázmány Péter Sétány 1/A

A fehérjék citrullinációja, egy fontos poszt-transzlációs módosulás, melynek következtében a citrullinálódott fehérjék felhalmozódása számos neurodegeneratív, autoimmun és rákos megbetegséggel kapcsolatba hozható. Eddigi kutatások alapján ezen betegségek közé tartoznak például a rheumatoid arthritis, az Alzheimer-kór és a sclerosis multiplex. [1][2] Az elmúlt években kimutatták, hogy a fehérjék túlzott deiminációja és a peptidil-arginin deimináz (PAD) enzimek felhalmozódása hozzájárult a fentebb említett betegségek kialakulásához és progressziójához.[3] Munkám során PAD enzimek autocitrullinációját tanulmányoztam a fehérjék és peptidek szerkezetvizsgálatában és a poszt-transzlációs módosulások azonosításában is kiemelkedő fontosságú HPLC-MS/MS technika alkalmazásával.



Kísérleteim fő célja a citrullinációt okozó peptidil-arginin deimináz enzimesaládon belül a PAD2 és PAD4 enzimek *in vitro* autocitrullinációja során citrullinná alakult argininek azonosítása volt. Céлом volt az autocitrullináció időfüggésének vizsgálata maximum két napig tartó inkubációs idő mellett. A módosítási helyek felderítéséhez a fehérjéket enzimatisz emésztésnek terveztem alávetni párhuzamosan két különböző emésztőenzimmel (tripszin, ProAlanáz), majd a keletkező peptideket HPLC-MS/MS módszerrel terveztem azonosítani egy nagy felbontású és nagy tömegpontosságú tandem tömegspektrométerrel.

A peptidtérképezésből nyert MS/MS spektrumok részletes vizsgálatával megbízhatóan azonosítottam a citrullinált peptideket, mind a citrullinációra jellemző 0,984 Da tömegnövekedés, mind citrullin specifikus izociánsav (HNCO) semlegesvesztés bizonyításával. Eredményeim azt mutatják, hogy a PAD2 enzim esetében a citrullinációs találatok a szekvenciában random eloszlást mutatnak, viszont a PAD4 enzim esetében a szekvencia közepére összpontosulnak. A 484-es pozíciójú citrullinált arginin az enzim aktív helyéhez is közel esik, amiből következhet, hogy a PAD4 enzim esetén az autocitrullináció befolyásolhatja az enzim aktivitását és még akár a szubsztrátspecifitását is. Az azonban mind a PAD2, mind a PAD4 enzim esetében megfigyelhető, hogy a legtöbb citrullinálódott arginin az enzim Ca²⁺-ion kötőhelyeinek közelében alakult át. Eredményeim fontos új információkkal szolgálhatnak a PAD enzimek *in vivo* autocitrullinációjának és szerkezeti összefüggéseinek megértéséhez.

[1] Claudio Soto, Nat. Rev. Neurosci., **2003** (4), 49–60.

[2] A. Suzuki, K. Clin. Exp. Rheumatol., **2015** (33), 40–43.

[3] S. Mondal, P. R. Thompson, Acc. Chem. Res., **2019** (52), 818-832.

Szeretném megköszönni témavezetőim (Dr. Schlosser Gitta és Papp Dávid) odaadó munkáját, akik nélkül kutatásom nem készülhetett volna el.

Szerves és szervetlen részecske diszperziók ICP-MS vizsgálatára alkalmas 3D nyomtatott mintabeviteli rendszer fejlesztése és alkalmazása

Kajner Gyula^a, Galbács Gábor^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Dóm tér 7-8.

Az induktív csatolású plazma tömegspektrometria (ICP-MS) egy sokoldalú, széleskörben elterjedt (ultra)nyomelemanalitikai méréstechnika, melyet elsősorban folyadékminták analizálására alkalmaznak közel négy évtizede [1]. Az egyrészecske ICP-MS (spICP-MS) egy speciális ICP-MS alapú mérési módszer, amely részecskediszperziók (nanorészecske, sejt) karakterizálásra alkalmas [2]. Az ICP-MS műszerekben használt sztenderd mintabeviteli rendszerek nagy veszteségeik és szűk transzmittált cseppméreteloszlásuk miatt nem alkalmasak spICP-MS mérések hatékony kivitelezésére. Emiatt az utóbbi években elkezdtek megjelenni alternatív mintabeviteli rendszerek, melyek ezen problémákat hivatottak orvosolni [3].

Diplomamunkámban, az irodalomban elsőként egy teljes mértékben 3D nyomtatással készült ICP-MS mintabeviteli rendszer fejlesztése és alkalmazása került bemutatásra. A munkában bemutattuk a mintabeviteli rendszer tervezését, geometriájának finomhangolását numerikus (COMSOL Multiphysics) szimulációkon keresztül, üzemi paramétereinek optimalizálását oldatminták, nanodiszperziók és sejtszuszpenziók segítségével. Emellett összehasonlításra kerültek benne a 3D nyomtatott és a sztenderd mintabeviteli rendszer által generált aeroszol tulajdonságai, illetve a két rendszer analitikai teljesítőképessége sejtek és nanorészecskék egyrészecske ICP-MS analízise során. Végül egy alga sejttörzsön végzett sejtbiológiai méréssorozattal demonstráltuk, az új mintabeviteli rendszer előnyeit. Az a kísérleti eredmények alapján a 3D nyomtatott rendszer segítségével javítható az spICP-MS technika több fontos teljesítményjellemzője is; a részecske detektálási hatékonyság (kb. négyszeresére), a kimutatási határ, a jel/zaj viszony, illetve általa a módszer alkalmazhatóvá válik 10 μ m és 25 μ m közötti átmérővel rendelkező sejtek vizsgálatára is, amely számos új alkalmazási lehetőséget biztosít sejtbiológiai vizsgálatok során. Ezen tanulmánnyal elsőként mutattuk meg, hogy a 3D nyomtatással is előállítható olyan mintabeviteli rendszer, amelynek teljesítménye vetekszik a hagyományos technológiákkal gyártott rendszerekével.

- [1] F. Vanhaecke, P. Degryse: *Isotopic analysis: fundamentals and applications using ICP-MS*, Wiley-VCH: Weinheim, Germany, 2012 (első kiadás) 31–517.
- [2] M. D. Montano, J. W. Olesik, A. G. Barber, K. Challis, J. F. Ranville: *Anal. Bioanal. Chem.* **2016** (408), 5053–5074.
- [3] J. L. Todolí, J. M. Mermet: *Spectrochim. Acta Part B: At. Spectrosc.* 2006, 61, 239-283.

Köszönöm témavezetőmnek, Dr. Galbács Gábornak, hogy munkámat minden erejével támogatta, emellett köszönöm Bélteki Ádámnak, Cseh Martinnak, Vajda Balázsnak, Dr. Geretovszky Zsoltak, Dr. Ajtai Tibornak, Dr. Maróti Gergelynek és Papp Bernadettnek, hogy segítséget nyújtottak munkám elkészültében. Illetve köszönöm a pénzügyi támogatást a Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapjától.

Bifenilén tartalmú diaril-etén fotokapcsolók előállítása és vizsgálata

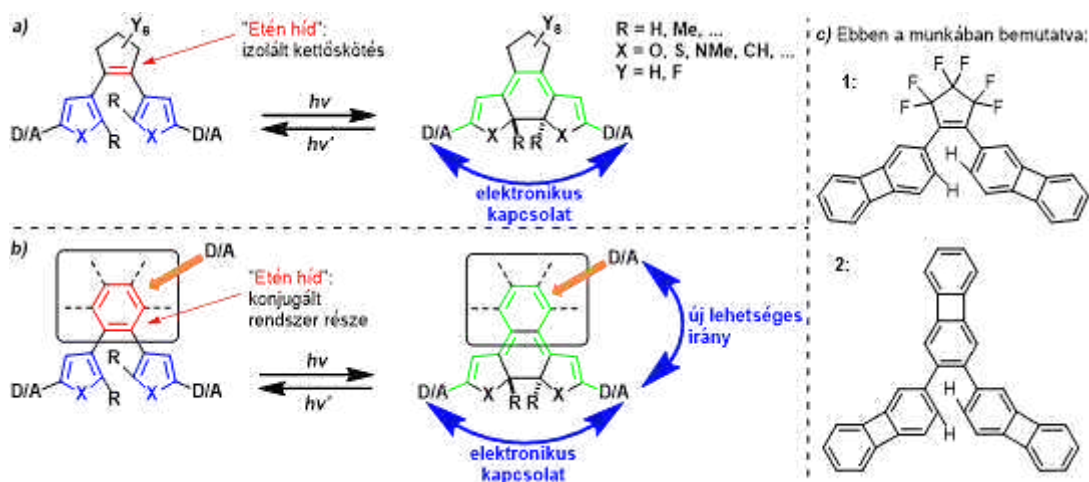
Zsignár-Nagy Barnabás^a, Mayer Péter J.^a, Dr. London Gábor^{a,*}

^aHUN-REN TTK, 1117, Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

A diaril-etén (DAE) típusú fotokapcsolók kiemelkedő kapcsolási teljesítményük miatt a szerves opto-elektronikától az orvosi biológiáig széleskörben alkalmazottak [1]. Fotokapcsolásuk során geometriájuk kis mértékben, míg molekulán belüli elektromos vezetőségük jelentősen megváltozik (ábra, a). Emiatt alkalmasak molekuláris áramkörök kiépítésére, tovább csökkentve a mikroelektronika mérettartományát [1].

Limitációjuk, hogy csak két régiójuk között változik a vezetőségük, pedig ha további régiókat is befolyásolnának, azzal még komplexebb áramköröket lehetne kialakítani [2]. Emiatt nagy az érdeklődés az etén híd konjugált rendszerbe ágyazása iránt (ábra, b) [3]. Kutatócsoportunk publikált olyan DAE-t, melyben az etén hidat bifenilén szolgáltatja [4]. Mivel ez a fotokapcsoló beváltotta a hozzá fűzött reményeket, fontos volt a bifenilén további alkalmazhatóságának vizsgálata.

Ebben a munkában bemutatunk két új, bifenilén részeket tartalmazó fotokapcsolót (ábra, c) szintézisét, és az eddig elvégzett fotokémiai jellemzését. Másik kutatónk előző munkájának [4] komplementereként először azt vizsgáltam, hogy a bifenilén a DAE-k diaril részeként is tud-e funkcionálni (1), majd egy olyan fotokapcsolót is vizsgáltam, melynek minden alegysége bifenilén (2). Munkám részeként fontos intermedierek szintézisét is kidolgoztam.



[1] H. B. Cheng, S. Zhang, J. Yoon *et. al: Adv. Mater.*, **2022** (34), 2108289.

[2] S. J. Molen, P. Liljeroth: *J. Phys. Condens. Matter*, **2010** (22), 133001.

[3] B. Oruganti, P. P. Kalapos, B. Durbeej *et. al: J. Am. Chem. Soc.*, **2020** (142), 13941–13953.

[4] P. P. Kalapos, P. J. Mayer, G. London *et. al: J. Org. Chem.*, **2022** (87), 9532–9542.

Az alábbi sorokkal szeretném megköszönni témavezetőim – Mayer Péter és London Gábor – munkáját, nélkülük kutatásom nem készülhetett volna el.

Átmenetifém-oxid tartalmú halloysit nanokompozit fotokatalizátorok fejlesztése

Tóth Eliza^a, Zsirka Balázs^b, Vágvölgyi Veronika^b

^a Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Bio-, Környezet és Vegyészmérnöki Kutató-Fejlesztő Központ, Fenntarthatósági Megoldások Kutatólaboratórium,

^b Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, Analitikai Kémia Kutatócsoport

A természetes agyagásványok környezetbarát jellegük, előnyös, módosítható felületi és fizikai-kémiai tulajdonságaik, valamint kedvező áruk miatt ígéretes nyersanyagok lehetnek a korszerű környezettechnológiában és a kármentesítés területén is. Felhasználásuk jelenleg széleskörű (ipar, mezőgazdaság, gyógyászat). A halloysit (1:1 típusú agyagásvány) kismértékű fotokatalitikus aktivitása kompozitképzéssel, például átmeneti-fémoxidok felületi rögzítésével, jelentősen javítható. A környezettechnológiai alkalmazás elősegítéséhez az energiahatékonyabb mágnesszeperációs elválasztás is alkalmazható lehet, centrifugálás helyett, amennyiben a kompozit mágnesezhetőségét magnetit részecskék beágyazásával biztosítjuk.

Dolgozatom célja halloysit hordozón rögzített magnetit és nikkel/cink vegyesoxid tartalmú kompozitok laboratóriumi szintézise, szerkezetvizsgálata, mágneses elválaszthatóságának és fotokatalitikus aktivitásának minősítése. A magnetit előállításához, vas(II)-klorid és vas(III)-klorid oldatokból kiinduló szintézis megtervezése és kivitelezése volt a kritikus lépés. A sikeres magnetit szintézis után, a megfelelő magnetit arányt a magnetit-halloysit kompozitok előzetes üleptíthetőségének és a mágneses szuszceptibilitásának eredményeiből határoztam meg. A vegyesoxidok előállítása a magnetit-halloysit kompozit felületén csapadékképzéssel Ni(OH)_2 és Zn(OH)_2 prekursoron keresztül, hőkezeléssel történt. Az előállított minták szerkezetét nagyműszeres analitikai módszerekkel minősítettem (XRD, FTIR-ATR, BET-SSA, TEM-EDX), a magnetitet tartalmazó kompozitok mágneses szuszceptibilitása impedancia spektroszkópia alkalmazásával került meghatározásra. Az optimális NiO/ZnO aránnyal kialakítottam a magnetit-halloysit kompozitokat, amelyben a vegyesoxid tartalom 20-30 m/m%, a magnetit tartalom 40-48 m/m% között változott. Az előállítás sikerességét és a szerkezetváltozást XRD és FTIR segítségével követtem nyomon. Az előállított vegyesoxidot tartalmazó mintákban UV bevilágítás hatására keletkező $\bullet\text{OH}$ gyökök mennyiségét kumarin gyökbefogó és emissziós spektroszkópia alkalmazásával határoztam meg.

Kulcsszavak: halloysit-kompozit, magnetit-kompozit, vegyesoxid, mágnesszeperáció, fotokatalizátor

A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült. (Tóth Eliza)

Szupramolekuláris és katalitikus kémiában előforduló bonyolult molekuláris kölcsönhatások pontos modellezése

Lőrincz Balázs^a, Nagy Péter^a

^aBME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest Műegyetem Rkp.3. F ép. I. lh. mfszt.

A bio- vagy katalitikus kémiában nagy számban jelen lévő, pl. a reakciómechanizmust is jelentősen befolyásoló intermolekuláris kölcsönhatások kísérleti és számítógépes modellezés alapú vizsgálata is rendkívül bonyolult. Például a számításhoz kémiában rutinszerűen alkalmazott sűrűségfunkcionál módszerek a távolra ható kölcsönhatásokat jelentős közelítésekkel tudják csak kezelni. Ezzel szemben a nagy pontosságú hullámfüggvény módszerek (pl. a csatolt klaszter, coupled cluster, CC módszer) szisztematikusan pontosíthatók, de hagyományos formájukban 20-25 atomos molekulákra is már túlságosan számításigényesek. További nehézség, hogy a nem kovalens kölcsönhatások pontos modellezésére jóval kiterjedtebb báziskészletet kell alkalmaznunk.

A hullámfüggvény módszerek számítási igényének csökkentésére a BME Spektroszkópia Kutatócsoport is javasolt hatékony eljárásokat (lokális természetes pálya, local

natural orbital, LNO módszer), így akár több száz atomos molekulák pontos vizsgálata is lehetővé vált [1]. Egy közelmúltban készült tanulmány azonban megmutatta, hogy a kiterjedt és polarizálható molekulakomplexek esetén az LNO-CCSD(T) és további referencia módszerekkel számított kölcsönhatási energiák néhány bonyolult esetben nincsenek összhangban.[2]

Ezek az előzmények motiválták, hogy a kölcsönhatási energiák számítását tovább pontosítsam a molekulakomplexek monomerei közötti kölcsönható régióba helyezett bázisfüggvények felhasználásával (nem atomcentrált, NAC bázisfüggvények). Mivel a korábbi, viszonylag kis méretű NAC bázist hasznosító tanulmány csak kisebb (10-20 atomos) molekulakomplexeket vizsgált [3], ezért több új NAC bázis alapú számítási protokollt dolgoztam ki, melyek akár több száz atomos komplexekre is alkalmazhatók. Többek közt optimalizáltam a NAC függvények helyzetét, számát, illetve exponenseit a leggyakrabban használt atomcentrált báziskészleteket kiegészítve olyan módon, hogy ez nagyobb és általánosabb szerkezetű molekulakomplexek esetén is alkalmazható legyen. Az új stratégiákat az LNO-CCSD(T) módszerekkel ötvözve kiterjedt szupramolekuláris komplexek kölcsönhatásának, valamint még nehezebben modellezhető organokatalitikus reakciók átmeneti állapotainak leírására hasznosítottam. Az eredmények alapján a kidolgozott NAC bázis alapú módszerek jelentősen növelik a számított molekuláris kölcsönhatások pontosságát, illetve csökkentik a teljes bázis határ eléréséhez szükséges számítási igényt.

[1] Nagy, P.R., Kállay, M., *J. Chem. Theory Comput.* **15**, 5275 (2019)

[2] Al-Hamdani, Y.S., Nagy, P.R., Barton, D., Kállay, M., Brandenburg, J.G, Tkatchenko, A., *Nat. Commun.*, **12**, 3927 (2021)

[3] Matveeva, R., Falck Erichsen, M., Koch, H., Høyvik, I.-M., *J. Comput. Chem.*, **43**, 121 (2022)

NÍVÓDÍJAS ELŐADÁSOK SEKCIÓJA II.

Monoklonális antitestek elektroporlasztásos ionizációs tömegspektrometriával kapott spektrumainak vizsgálata

Szabó Ruben^a, Gáspár Attila^a

^a*Debreceni Egyetem, Debrecen, Egyetem tér 1, 4032*

A monoklonális antitest hatóanyagot tartalmazó biológikumok analitikájának egyik legjelentősebb eszköze a tömegspektrometria, mely a minta ionizációját igényli. Ennek egyik elterjedt módja az elektroporlasztásos ionizációs technika, mely nagy molekulák esetén számos eltérő töltésformát eredményez. Különböző mAb tartalmú készítmények vizsgálata során a mintában lévő mátrixkomponensek jelentős hatását figyeltem meg az antitest ionizációjára. A cetuximab ionizációját a mintához adott sav és illékony szerves oldószer, valamint a készítményben található detergens eltávolítása elősegítette. Rituximab tartalmú készítményből CE kapillárisba injektált mintadugó és a kapillárisban lévő hangyasav oldat határfelületén mért spektrum jelentős javulást mutatott a tömbfázisban mérthez képest, melyet a nagy molekulatömegű antitest és a kis molekulatömegű mátrixkomponensek különböző mértékű Taylor-Aris diszperziójának köszönhető részleges szeparáció okozott.

Mivel a monoklonális antitestek ESI-MS spektrumában számos töltésforma csúcsa jelenik meg, a spektrumok speciális feldolgozást igényelnek. Az antitest tömegspektrumának dekonvolúciójával egy töltés nélküli spektrumot hozhatunk létre. Ez a mért spektrum egyes töltésformáihoz nagyon hasonló, azonban jobb jel/zaj aránnyal és nagyobb tömegpontossággal rendelkezik, ami az egyes csúcsok azonosítását és azok tömegének meghatározását segíti. A Bruker Maximum Entropy dekonvolúciós paramétereinek hatását vizsgáltam. A dekonvolált tömegtartományt nem célszerű a szükségesnél szélesebbre állítani, mivel az szatellitcsúcsok megjelenéséhez vezethet. Ha a dekonvolúcióhoz túl széles m/z tartományt használunk fel, a dekonvolált spektrumban megnőhet a zaj szintje, túl szűk tartomány esetén viszont a spektrum egyes részletei elveszhetnek, valamint csökkenhet a tömegpontosság. A dekonvolált spektrumban lévő zaj miatt a csúcsmaximumok meghatározásához a spektrum simítására van szükség. Célszerű minél kisebb mértékű simítást végezni, mivel ez a meghatározott tömegeket befolyásolja, valamint apró részletek elvesztését okozhatja. Alapvonal-korrekció alkalmazása esetén a spektrum csúcsai ránézésre jobban elkülönülnek, ez azonban a csúcsok alakjára, valamint a csúcsmaximumok értékére is hatással van, ezért használatát célszerű kerülni.

Három különböző szoftverrel elvégezve ugyanazon spektrum azonos tartományú dekonvolúcióját, a dekonvolált spektrumok nagyfokú hasonlóságot mutattak, az egyes csúcsmaximumok relatív standard deviációja pedig csupán 1 ppm körüli volt. Trastuzumab dekonvolált spektrumát elméleti és irodalmi adatokkal összehasonlítva az egyes csúcsok maximumai többnyire ~ 3 Da-nal az elméleti érték fölött voltak, amit valószínűleg különböző adduktok, más proteoformák jelenléte vagy a tömegkalibráció pontatlansága okozhat.

Hálásan köszönöm a ScanoMed Kft. munkásainak Dr. Nagy Gábornak és Dr. Vágner Adriennek, hogy a monoklonális antitest tartalmú gyógyszerkészítmények biztosították, valamint az Emberi Erőforrások Minisztériuma Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatását (ÚNKP-22-2-I-DE-193).

A tehetséggondozás lehetőségei a kémia- és matematikatanítás szempontjából

Makai Tímea Kamilla

Debreceni Egyetem hallgatója

A kémia tanításának sarkalatos pontjai közé sorolandó a tehetséggondozás és a kémia matematikával való kapcsolata. Dolgozatomban ezt tárgyaltam egy új szemszögből. Célom az volt, hogy a Magyarországon jelen levő tehetséggondozás határait feltérképezsem, és az ismereteket a gyakorlatban hasznosítsam.

Rávilágítottam a kémia- és matematikaoktatás kohéziójára és az új NAT (2020) alapján fellelhető problémákra. A Curie Emlékversenyeket elemeztem, mint kémiával foglalkozó verseny családot. Majd a sokak által ismert KÖKÉL és Chemistry Today feladatait is megvizsgáltam a dolgozatban, mely rávilágított a feladattípusok sokféleségére és egyenletes elosztására.

Vizsgálódásom során arra jutottam, hogy a jó versenyeredmények érdekében a számításos feladatok kihagyhatatlanok a tehetséggondozásból. Leggyakrabban az arányossági és a konvergens gondolkodás szükségeltetnek, mint kompetenciák a versenyfeladatok megoldásához. Ezen ismeretekkel felvértezve céltudatosabban tudjuk készíteni a diákjainkat a versenyekre.

Köszönettel tartozom témavezetőmnek, Fejesné Dr. Dávid Ágnesnek, a Kémia Intézet Szakmódszertani csoportjának az oszlopos tagjának, amiért fáradtságot nem kímélve segített megvalósítani ezt a dolgozatot. Köszönetemet szeretném kifejezni a Curie Kémia és Környezetvédelmi Tehetségsegítő Tanács minden tagjának a szakadatlan munkájukért és azért, mert nagy szeretettel felkaroltak.

Ezen szakdolgozat a Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar Kémia Intézetének keretein belül valósult meg.

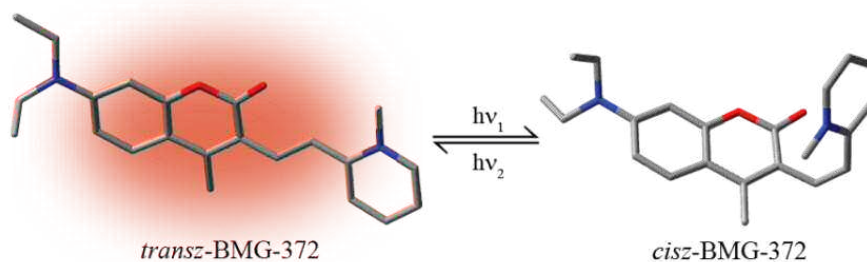
Kumarinvázis fotokapcsoló gerjesztett állapotú folyamatainak vizsgálata

Kiss Etelka, Dr. Kubinyi Miklós, Dr. Hessz Dóra

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

A fotokróm vegyületek különleges tulajdonsága, hogy adott hullámhosszú fénnel besugározva megváltozik a molekuláris szerkezetük. A reakció reverzibilis, a visszaalakulás történhet más hullámhosszú fény hatására vagy termikus úton. A fotokapcsolók olyan speciális fotokróm vegyületek, melyekre nem jellemző a termikus visszaalakulás, szerkezetüket tartósan megőrzik. Optikai szenzorokban és memóriákban, valamint gyógyszermolekulák célba juttatásában való alkalmazásuk új dimenziókat nyit az anyagtudomány és orvostudomány számára.

Kutatásaimban a 7-dietilamino-4-metil-kumarin-3-il-vinil-metilpiridin-1-ium-jodid (BMG-372) fotokapcsoló molekulát vizsgáltam, amely zöld fény hatására a stabilabb transz-formából citromsárga cisz-formává alakul át. UV-sugárzás hatására visszaalakul a narancssárga transz-formává. A BMG-372 új vegyület, a Természettudományi Kutatóközpontban állították elő.



Mivel a két forma színe eltérő, a fotoizomerizációs reakció mindkét irányba követhető UV-Vis abszorpciós spektroszkópia segítségével. A fluoreszcencia kísérletek azt mutatták, hogy a transz forma erősen emittál, ezzel szemben a cisz forma emissziója nem mérhető.

A gerjesztett állapotban végbemenő folyamatokat kémiai aktinometriás és fluoreszcencia kvantumhatásfok méréssel vizsgáltam. A kísérleti eredményeket összevetettem a Tanszéken végzett kvantumkémiai számítás eredményeivel, mely igazolta a termikus visszaalakulás kis valószínűségét. A két forma szerkezetét optikai és NMR spektroszkópiai módszerrel igazoltam.

A fotoizomerizációs reakciók mindkét irányba olyan fotostacionárius állapotokhoz vezettek, amelyek az izomereket nagy feleslegben tartalmazzák: a transz $\rightarrow$ cisz reakció esetén a fotostacionárius elegy 91 mol% cisz, a cisz $\rightarrow$ transz reakció ~100 mol% transz izomert tartalmazott. A fotókapcsolóként történő alkalmazás szempontjából fontos, hogy többször ismételt oda-vissza kapcsolást követően acetonitrilben és vízben sem tapasztaltunk számottevő fotofáradást. Minden kísérletet reprodukáltunk vizes oldatban is, bizonyítva, hogy a vegyületünk vízzeloldható fotókapcsolóként működik, ez lehetőséget teremt további, orvosi kémiában, biológiai képalkotásban alkalmazható kumarinvázis fotókapcsolók kidolgozására.

Kopolimerek karakterizálása gél permeációs kromatográfia és neurális háló alkalmazásával

Benedek Máté

A gél permeációs kromatográfia egy általánosan használt eljárás polimerek és kopolimerek molekulatömegének analíziséhez, azonban olyan fontos információkat, mint például kopolimerek összetétele, nem tud szolgáltatni. Azonban létrehoztunk egy gél permeációs kromatográfián és neurális hálók alkalmazásán alapuló módszert a kopolimerek részletes karakterizálásra. Ennek alapját különböző polaritású eluensekkel végzett GPC-mérések jelentették. Mesterséges neurális hálókat fejlesztettünk ki a párhuzamos GPC-s mérések során kapott adatok feldolgozására, valamint a kopolimerek molekulatömegének és kémiai összetételének meghatározására. A neurális hálók célértékeit MALDI-TOF tömegspektrometriával és NMR spektroszkópiával kaptuk. Munkánk legfőbb előnye, hogy a GPC, MALDI-TOF MS és ^1H NMR által kapott adatainkat tartalmazó adatbázis bármikor elérhető és bővíthető további kísérleti eredményekkel, valamint a neurális hálók tömegtartománya és pontossága is tovább javítható. Az összes mért adat és Excel-dokumentum nyilvánossá tehető, ami lehetővé teszi a kifejlesztett neurális hálók közvetlen gyakorlati alkalmazását, például egy három GPC módszerrel lemért poloxamer további injektálások és egyéb mérések nélkül karakterizálható.

Computational Study of Base-Catalyzed Thioester Isomerizations

Laczkó Gergely^a, Pápai Imre^b, Madarász Ádám^b

^a Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Kémiai Intézet

^b Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet, Elméleti Kémiai Kutatócsoport

Pihko and his co-workers studied the isomerization of β,γ -unsaturated-thioesters with pivalate salts and amide catalysts. Our research group investigated the mechanism of these reactions in collaboration with the Pihko group [1] and in my thesis I discuss the mechanistic study in detail. Most of the computations were carried out utilizing the density functional theory (ω B97X-D) and the most important results were validated with ab initio (LNO-CCSD(T)) calculations.

We first modeled the isomerization reactions with a pivalate anion (piv) as a catalyst, i.e., neglecting the counterions. We found that the reaction proceeds through three steps (deprotonation of the α -carbon, rearrangement, reprotonation at the γ -position) and among these, reprotonation is the rate determining step. According to the experiments, the reaction was faster with the cis thioester. The computed barrier is lower with the cis substrate and the difference can mainly be attributed to the different stability of the cis and trans enolates.

The reaction proceeds similarly with the other two catalyst 1,8-diazabicyclo(5.4.0)undec-7-ene (DBU) and triethyl-amine (TEA), and reprotonation was found to be rate determining in all the cases. The barriers are slightly higher with DBU than with piv, which is in contrast with the experimental order of the reactivities (faster reaction with DBU). The contradiction likely originates from the omission of the counterions. We investigated the possible coordination of the applied cations tetramethyl-ammonium (TMA) and tetramethylguanidinium (TMG) and we could account for the lower reactivity of TMG-piv (it stabilized the reference state to a greater extent than the transitions state) but not the TMA-piv, so the weakly coordinating TMA may have a less trivial effect.

Pihko et al. carried out experiments with β,γ -deuterated thioesters as well. We determined the experimental kinetic isotope effect (KIE) with the assistance of kinetic simulations. Both the KIE of the forward and the reverse reaction is in agreement with the theoretical (DFT) isotope effects, so we could conclude that indeed reprotonation is the rate determining step. The atomic charges in the enolates suggest that the electron density is greater at the α -position, which explains why this carbon is protonated through a lower barrier.

[1] S. Riuttamäki, G. Laczkó, A. Madarász, T. Földes, I. Pápai, P. M. Pihko, *Chem, Eur. J.*, **2022** (28), e202201030

I would like to express my gratitude to my supervisors Imre Pápai and Ádám Madarász, and Attila Császár and Ákos Galvács for checking the thesis.

BIOCHEMISTRY/BIOKÉMIA SZEKCIÓ

Magnetic polymer nanoparticles for mitomycin delivery: synthesis, characterization, and in vitro drug release

Keristina Wagdi K. Amin^{a,b}, Mohamed M. Abdelghafour^{a,c}, Viktória Hornok^a, Tamás Kiss^a,
Diána Szabó^d, László Rovó^d, László Janovák^{a*}

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

^b*Department of Chemistry, Faculty of Science, Suez Canal University, Egypt.*

^c*Department of Chemistry, Faculty of Science, Zagazig University, Egypt.*

^d*Department of Oto-Rhino-Laryngology and Head & Neck Surgery, University of Szeged, Hungary.*

Mitomycin C (MMC) has been used for many years in the medical field because of its ability to work as an antifibrotic, antibiotic, and antineoplastic agent. But it is associated with several side effects, such as gastrointestinal and renal damage, which can lead to a reduction in the required dosage. These undesirable effects are always attributed to its high level of toxicity and lack of selectivity. So, it was necessary to target MMC to the infected tissues by developing a targeted drug delivery system. To reach this goal, succinyl polyvinyl alcohol (PVA-SA), which can form self-assembled NPs, and magnetic nanoparticles (MNPs), which are good at targeting, were first synthesized. Then, self-assembled magnetic polymeric NPs were produced in a simple one-step process (at room temperature) without the use of any toxic crosslinkers. Before MMC encapsulation, different MNP weight ratios (5, 10, 15, and 20 wt%) are added to the system. The purpose of that was to determine the maximum MNP amount that could be used to provide stable colloidal dispersions. The formation of self-assembled NPs was successfully confirmed using turbidity, DLS, and TEM measurements. Based on turbidity studies, it was found that attaching PVA-SA to MNP doesn't change its ability to form self-assembled particles. According to DLS, dispersing NPs in phosphate-buffered saline (pH 7.4, 0.9% NaCl) reduced particle size and enhanced size homogeneity. Moreover, TEM confirmed the spherical morphology of both PVA-SA and MNPs-PVA-SA NPs. Increasing MNP content up to 10 wt% showed high suspension stability and good size stability as a function of time. Moreover, samples containing either 5 wt% or 10 wt% MNPs achieved high MMC binding efficiencies (98%). The MMC-loaded NP size was about 96.5 ± 9.1 nm at 5% MNP content and 128 ± 9 nm at 10% MNP content. In contrast to the free MMC, the bound one showed prolonged release under physiological conditions, with a cumulative drug release of 50%. All NPs exhibited good magnetic responses. Hopefully, the presented polymeric NPs with both favourable magnetic properties and prolonged drug release will be used as a targeted drug delivery system.

Acknowledgments

This work was supported by the (OTKA) K 132446, UNKP-23-5 New National Excellence Program and János Bolyai Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences.

Development of corticosteroid-loaded liposomes

Bálint Budavári^aPharmD, Angéla Jedlovsky-Hajdú PhD^a, Krisztina S. Nagy^a PhD

*^aDepartment of Biophysics and Radiation Biology, Laboratory of Nanochemistry, Semmelweis University.
(1085 Budapest, Üllői út 26.)*

Introduction: Liposomes are nanoscale drug delivery systems that have many benefits regarding biodistribution, absorption and controlled drug release. Corticosteroids are lipophilic active agents which means that they integrate into the lipid bilayer. This novel approach can improve the efficacy of several anti-inflammatory therapies.

Aims: Our goals were to create liposomes with long-term stability, furthermore which can incorporate and release corticosteroids at inflamed body temperature. Considering the possible future application in asthma therapy, we also aimed at reaching high entrapment efficacy and slight drug leakage from the vesicles.

Methods: Two kinds of liposome samples were prepared from three different kinds of phospholipids by the widely used thin layer hydration method and subsequent extrusion to get small unilamellar vesicles. Prednisolone (Pred) and budesonide (Bud) were used as active agents. Stability tests were executed by dynamic light scattering (DLS) while entrapment efficacy was determined by size-exclusion gel chromatography. The effect of liposomal drugs on cell viability was measured on the EBC-1 human lung carcinoma cell line. The internalization of the liposomes was studied by flow cytometry and confocal microscopy too.

Results: Unilamellar vesicles with 100 nm in diameter were successfully prepared. Their hydrodynamic diameter has remained in the desired range through 12 months in case of the vast majority of the samples. It turned out that the type of the corticosteroid has only weak effect on the stability of the liposomes but their presence is more important. The entrapment efficiency was exceptionally high in both cases (between 74-87%) and the drug leakage was 35-40 % for Pred and 6-8 % for Bud in the first 30 min. Neither the free corticosteroids, nor their liposomal form affected significantly the cell viability. Confocal microscopy images and flow cytometry results proved equally the internalization of the vesicles by the cells.

Conclusion: We have successfully created corticosteroid-loaded liposomes with long-term stability (12 months) and excellent entrapment efficiency due to the lipophilic character of the applied drugs. Furthermore, they are not toxic and can be internalized by the investigated pulmonary cells.

Funding:

Semmelweis 250+ Excellence PhD Scholarship, EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00009, NKFI FK 124147, TKP2021-EGA-23

The interaction between mucin and poly(amino acid)s with controlled cationic group content

Gergely Stankovits^a, Ágnes Ábrahám^b, Éva Kiss^b, Zoltán Varga^{a,c}, András Szilágyi^a,
Benjámin Gyarmati^a

^aDepartment of Physical Chemistry and Materials Science, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Műegyetem rkp. 3., H-1111 Budapest, Hungary

^bLaboratory of Interfaces and Nanostructures, Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Pázmány Péter Sétány 1/A, H-1117 Budapest, Hungary

^cResearch Centre for Natural Sciences, Institute of Materials and Environmental Chemistry, Magyar tudósok körútja 2, H-1117 Budapest, Hungary

Mucosal surfaces are important targets for drug formulations as they provide high permeability and enable avoiding first-pass metabolism [1]. The two main concepts for utilising these surfaces are mucoadhesion and mucopenetration; both require the fine-tuning of colloidal interactions between the polymer excipient(s) of the formulations and the mucin proteins, the major component of the mucus secreted by the mucosa. Our goal here is to reveal the role of charge density in mucin-polymer interactions both in dispersion and in thin layers. To this end, the class of polyaspartamides was chosen because of their chemical versatility, biocompatibility and biodegradability [2]. Polyaspartamides were characterised by size exclusion chromatography, potentiometric titration and haemolysis assay. Colloidal interactions between the mucin protein and synthetic polyaspartamides were tested by dynamic light scattering, zeta potential measurements and turbidimetric titration as a function of polymer-to-mucin mass ratio (3D methods). Mucin-polymer interactions were further analysed in a thin mucin layer (2D) to model life-like situations using a quartz crystal microbalance (QCM) in flow mode (Figure 1). The highest adsorption on mucin occurred at intermediate cationic side group content shown by QCM, and a close correlation was found between the bulk (3D) and thin layer (2D) interactions [3].

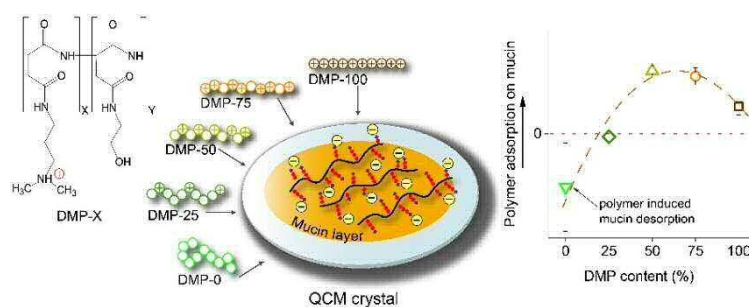


Figure 1. Adsorption of polyaspartamides with different cationic side group content on a thin layer of mucin adsorbed on a QCM crystal [3]

[1] J. D. Neves et al.: Chemical Society Reviews **2020** (49), 5058–5100

[2] A Mammadova et al.: Journal of Materials Chemistry B **2022** (10), 5946–5957

[3] G Stankovits et al.: Int J Biol Macromol **2023** (253), 126826

Project no. TKP-9-8/PALY-2021 has been implemented with the support provided by the Ministry of Culture and Innovation of Hungary from the National Research, Development and Innovation (NRDI) Fund, financed under the TKP2021-EGA funding scheme. Further support was provided by the NRDI Office via grants FK 138029 and 2021-4.1.2-NEMZ_KI-2022-00026. Supported by the ÚNKP-23-3-II-BME-185 New National Excellence Program of the Ministry for Culture and Innovation from the source of the National Research, Development and Innovation Fund.

A mukoadhézió értelmezése hidrogél felszínen

Szayly Kata, Stankovits József Gergely, Gyarmati Benjámín Sándor

Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Műgyetem rkp. 3., H-1111 Budapest

A szisztémás és helyi gyógyszeradagolás egyre népszerűbb módja a mukoadhezív tablettákkal és tapaszokkal különböző nyálkahártyákon keresztül megvalósuló hatóanyag-leadás. A mukoadhézió során lejátszódó folyamatok tanulmányozása és megértése ezért igen fontos, ugyanakkor a biológiai mintákon végzett vizsgálatok a minták természetes diverzitása miatt nehézkes. Több kutatás is arra az eredményre jutott, hogy szintetikus nyálkahártya-analógok segítségével a szilárd dózisformák mukoadhéziójának erőssége jól előrejelezhető lehet [1]. A szintetikus analógok fontos előnye a biológiai mintákhoz képest a könnyebb kezelhetőség és a jobb reprodukálhatóság. A polimer hidrogélek ígéretes nyálkahártya-analógok, mely elsősorban a természetes nyálkahártyához hasonlóan viszkoelasztikus sajátosságuknak köszönhető [2][3]. Ezen rendszerek nyálkahártya-analóggént történő alkalmazásához nélkülözhetetlen az adhéziós viselkedésük minél átfogóbb megismerése, mely a szakirodalomban még csak kevés vizsgált terület.

A Lágú Anyagok Kutatócsoport mesterséges nyálkahártya-analóg hidrogéleket fejlesztett ki az elmúlt években a mukoadhézió reprodukálható modellezésére [4]. A témához kapcsolódóan saját kutatómunkám lényegi része poli(vinil-alkohol) (PVA) hidrogélek felszínén szilárd polimer tabletták tapadásának jellemzése, valamint a tapadást a nyálkahártya-analóg részéről befolyásoló tényezők felderítése. A mérésekhez fagyasztás-olvasztásos módszerrel fizikailag térhálósított PVA géleket állítottam elő. A hidrogélek viszkoelasztikus tulajdonságait kétféle módon, a polimer koncentráció, valamint a fagyasztás-olvasztás ciklusok számának változtatásával szabályoztam. Az elkészített hidrogéleket oszcillációs reológiai vizsgálattal jellemeztem. Ezen hidrogéleken általam préselt polimer referencia tablettákkal egytengelyű nyújtással mértem az adhéziós munkát és az adhéziós erőt. Megállapítottam, hogy a hidrogélek viszkoelasztikus tulajdonságai és az adhézió erőssége között szoros összefüggés áll fenn. Következő lépésként a valódi nyálkahártyák kémiai funkcionalitását jobban modellező, mucin fehérjét, a nyálkahártya fő makromolekuláris elemét is tartalmazó PVA hidrogéleket állítottam elő. A mucin fehérje mukoadhézióban betöltött szerepe igen fontos a mucin-polimer (dózisforma) másodrendű kölcsönhatásokon keresztül. A várákosoknak megfelelően a hidrogélek viszkoelasztikus tulajdonságait a mucin jelenléte a nyálkahártyához hasonlatosabbá tette, és a továbbiakban ezen hidrogéleken fogom tanulmányozni az adhéziós sajátosságokat.

[1] M. T. Cook, V. V. Khutoryanskiy: *Int. J. Pharm.*, **2015** (495), 991-998

[2] D. J. Hall et al.: *Soft Matter*, **2011** (7), 9620-9623

[3] N. A. Peppas, J. J. Sahlin: *Biomaterials*, **1996** (17), 1553-1561

[4] B. Gyarmati et al.: *Colloids Surf. B: Biointerfaces*, **2022** (213), 112406

A Kulturális és Innovációs és Minisztérium ÚNKP-23-1-I-BME-203 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült. A munkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) OTKA FK 138029 projektje támogatta.

Elnyújtott hatóanyag-leadás poliszukcinimid és poli(vinil-pirrolidon) alapú szálas mátrixokból

Mihalovics Bence, Gyarmati Benjámin, Szilágyi András

Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Műegyetem rkp. 3., H-1111 Budapest, Hungary.

A szem bakteriális és vírusos fertőzésinek kezelése topikális gyógyszerkészítmények segítségével történik. A lokálisan alkalmazott gyógyszerkészítmények számos hátránnyal rendelkeznek, melyek a szem védekező mechanizmusaiból (könny-kiválasztás, pislogás) adódnak. A leggyakrabban alkalmazott szemészeti gyógyszerformula, a szemcsepp, kis biohasznosulása (~5-10 %) is nagyrészt ezen mechanizmusok következménye. Megoldást nyújthat a biohasznosulás növelésére amorf szilárd diszperziók inzerként történő alkalmazása. A retard szemészeti inzertereket szemhéj alá helyezve hosszú időintervallumban biztosíthatjuk a hatóanyag kívánt terápiás koncentrációját, kiküszöbölve a szemcseppek pontatlan adagolását is [1].

Amorf szilárd diszperziók előállítására korszerű lehetőség az elektrosztatikus szálképzés. A technológia alapja, hogy egy nem zérus dipólus momentummal rendelkező molekulákból felépülő folyadék egy elektrosztatikusan töltött és egy földelt fém között elmozdul, sugarat képez. Polimer oldatok esetében a folyamat során az oldószer elpárolog, a statikusan töltött polimer láncok pedig taszítják egymás. A polimer szálat érő húzófeszültség a keletkező szálat teljes száradás előtt megnyújtja, ezzel annak átmérője jelentősen csökken. A szálképzést számos paraméter befolyásolja. Ezeket általában három csoportra osztjuk: a polimer oldat fizikai-kémiai tulajdonságai (viszkozitás, felületi feszültség és vezetőképesség), a technológiai paraméterek (a polimer oldat térfogatárama, az elektromos feszültség és a szálképző kapilláris-szálfogó távolság (emitter-kollektor távolság)) és a környezeti tényezők (hőmérséklet, relatív páratartalom) [2].

Munkám célja egy időben elnyújtott hatóanyag-leadást biztosító polimer mátrix előállítása volt elektrosztatikus szálképzéssel. A kutatás célja egy, a szemészetben alkalmazható antibiotikummal, a rifampicinnel, kapcsolatban felmerülő problémák megoldása volt. A rifampicin szemészeti alkalmazása jelenleg magisztrális szemcsepp formájában történik. A szemcseppek fentebb említett hátrányain túl felmerül a rifampicin stabilitásának problémája is, ugyanis vizes közegben a hatóanyag hidrokinnon-kinnon átalakulást szenved [3]. Ezen problémákat egy poliszukcinimid (PSI) és poli(vinil-pirrolidon) (PVP) polimert tartalmazó szálas mátrix előállításával küszöböltem ki. A rifampicin stabilnak bizonyult a szálképzés oldószerében (dimetil-formamid). A szálképzési kísérletek során bizonyítottam, hogy nagy molekulatömegű PVP kis mennyiségben (<5 % a PSI-re nézve) elősegíti a kis molekulatömegű PSI szálképzését. Az elnyújtott kioldódást a két polimer vízzoldhatóságának különbsége biztosította.

[1] P. Pahuja et al.: *Expert Opin Drug Deliv.*, **2012** (9), 837-861.

[2] Cs. Németh et. al.: *Eur. Polym. J.*, **2020** (130), 109624.

[3] N.G. Schwartz et al.: *Lancet Infect Dis.*, **2022** (22), 1617-1625

A munkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) OTKA FK 138029 projektje támogatta.

Antioxidáns és proteáz aktivitással rendelkező nanokompozitok fejlesztése

Kónya D. Zsuzsanna^a, Szerlauth Adél^{a,b}, Szilágyi István^{a,b}

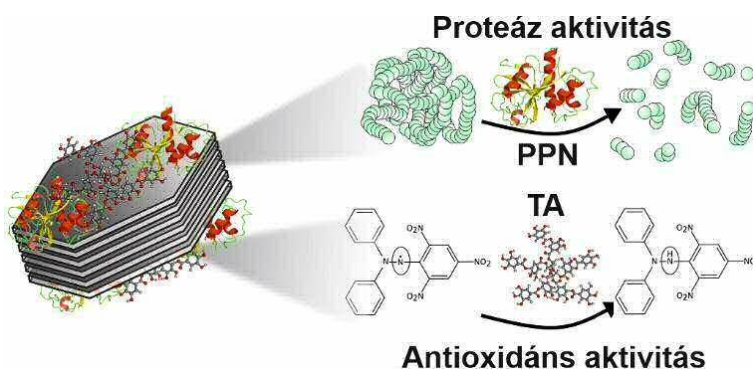
^aSzegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Lendület Biokolloidok Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1, Magyarország

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

Az élő szervezetek megfelelő működéséért biomolekulák számos típusa felel: az antioxidánsok a reaktív oxigén származékok (ROS) hatástalanítását végzik [1], az enzimek különféle folyamatok katalizátoraként viselkednek [2]. Mind az antioxidánsok (AO-k), mind az enzimek érzékenyek a környezeti hatásokra (pl. fény- és hőérzékenység, csekély vízoldhatóság, pH-függés), így azok nem megfelelő körülmények között elveszítik aktivitásukat. Az említett problémák kiküszöbölésére ezen biomolekulák hordozón való rögzítése jelenthet megoldást. A réteges kettős hidroxidok (LDH-k) felületén és rétegei között számos molekula rögzíthető, így alkalmasak lehetnek a hordozó szerepére [3].

Jelen munkában a tannin (TA) és a papain (PPN) aktivitását és stabilitását külön-külön és keverék formájában is vizsgáltuk. Ellenállóképességük növelése és kombinált használatuk megkönnyítése érdekében a molekulákat LDH részecskék felületén elektrosztatikus kölcsönhatások révén rögzítettük. Immobilizálás során az eredetileg pozitív töltésű LDH-részecskéket a TA adszorpciójával áttöltöttük, majd a PPN-t a negatív töltésű felületen rögzítettük. A TA és PPN LDH-n való sikeres rögzítését Raman-spektroszkópiás mérésekkel és Bradford-teszttel igazoltuk. Az immobilizáció után az LDH/TA és LDH/TA/PPN kompozitok aktivitása lecsökkent a szabad molekulákéhoz képest, de még így is számottevő maradt. Az LDH-k kolloidstabilitása nem változott jelentősen a két biomolekula adszorpciója után, azonban hőkezelés hatására az öt rendszer (TA, PPN, keverék, LDH/TA és LDH/TA/PPN) aktivitása nemlineárisan változott a hőmérséklet emelésével.

Az előállított LDH/TA/PPN kompozit megtartotta a szabad molekulák antioxidáns és proteáz aktivitását, mely lehetővé teszi felhasználását olyan ipari folyamatokban (pl. kozmetikai- és élelmiszeripar), ahol a gyökfogó és fehérjebontó tulajdonság együttes alkalmazása előnyökkel járhat.



[1] S. B. Nimse, D. Pal: *RSC Adv.*, **2015** (35), 27986-28006

[2] J. F. Lucas, D. Castaneda, D. Hormigo, *Trends Food Sci. Technol.*, **2017** (68), 91-101

[3] A. Szerlauth, Z. D. Kónya, G. Papp, Z. Kónya, Á. Kukovecz, M. Szabados, G. Varga, I. Szilágyi: *J. Colloid Interface Sci.*, **2023** (632), 260-270

GYÓGYSZERÉSZETI KÉMIA SZEKCIÓ

2-Acetil-piridin-aminoguanidin Schiff-bázisok és fémkomplexeik oldategyensúlyi és redoxi tulajdonságaik

Gátszegi Gerda T.^a, Tatsiana V. Petrasheuskaya^a, Vladimir B. Arion,^b Spengler Gabriella^{a,c}

Enyedy Éva A.^a

^aMTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék,
Szegedi Tudományegyetem, Szeged, Dóm tér 7-8.

^bInstitute of Inorganic Chemistry, University of Vienna, Währinger Strasse 42, A-1090 Vienna, Austria.

^cOrvosi Mikrobiológiai Intézet, Szeged Szegedi Tudományegyetem, Szeged, Semmelweis u. 6.

A kemoterápiás rákellenes gyógyszerek használatát gyakran korlátozzák a fellépő súlyos mellékhatások és a kialakuló rezisztencia. Ezen problémák miatt újabb potenciális hatóanyagok, köztük fémkomplex fejlesztése vette kezdetét. Aromás Schiff-bázisok fémkomplexei gyakran mutatnak rákellenes és/vagy antimikrobiális hatást [1]. A tioszemikarbazonokkal analóg Schiff-bázis aminoguanidinek fémkomplexei között is találunk kiemelkedő biológiai aktivitást mutató vegyületet [2,3]. Egyes 2-acetil-piridin-aminoguanidin Schiff-bázisok rézkomplexei antioxidáns hatásuknak köszönhetően potenciálisan gátolják a karbonil stressz és a *diabetes mellitus* szövődményeinek kialakulását [3]. Ezen tulajdonságaik miatt nagy érdeklődés mutatkozik az aminoguanidinek, illetve fémkomplexeik vizsgálata iránt.

Jelen munkában hat 2-acetil-piridin-aminoguanidin alapvázatot tartalmazó ligandum és réz(II)-ill. vas(III/II)komplexek oldategyensúlyi és redoxi tulajdonságait jellemeztük pH-potenciometriás, UV-látható spektrofotometriás, ciklikus voltammetriás mérések segítségével. A réz(II)komplexek reaktivitását fiziológiás redukálószerrel is vizsgáltuk spektrofotometriás módszerrel. A meghatározott egyensúlyi állandók segítségével meg tudjuk állapítani, hogy az adott ligandum ill. fémkomplexe milyen formában van jelen vizes oldatban adott pH-n. Megállapítottuk, hogy a ligandumok fiziológiás pH-n döntően pozitív töltésű formában vannak jelen. A kapott stabilitási állandók alapján mind a réz(II)ionnal, mind a vasionokkal kis stabilitású komplexek képződnek. A vizsgált humán rákos sejteken (Colo205, Colo320, MCF7) a ligandumok nem, de a réz(II)komplexeik citotoxikusnak bizonyultak.

[1] G. Matela, *Anticancer Agents Med. Chem.*, **2020** (20), 1908-1917.

[2] O. Dömötör, et al., *Molecules*, **2022** (27), 2044.

[3] L.S. Vojinovic-Jesic, et al., *Polyhedron*, **2016** (117), 526-534.

Köszönetnyilvánítás: Ernst Mach grant MPC-2021-00073, LP2019-6/2019 (HUN-REN Magyar Kutatási Hálózat), TKP-2021-EGA-32 (NKFIH).

Új STAT5b inhibitorok tervezése és szintézise

Péczka Nikolett^{ab}, Bajusz Dávid^a, Petri László^a, Keserű György Miklós^a

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

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

A STAT fehérjék olyan jelátviteli és transzkripciós fehérjék, amelyek foszforilációt követően egy konformációs változáson esnek át, majd bejutnak a sejtmagba, ahol a transzkripciós folyamatokat szabályozzák [1]. Ezek közül a legfontosabbak a STAT3 és STAT5 fehérjék, melyek működési zavarai leukémiát idézhetnek elő. A klinikai gyakorlatban jelenleg nincs olyan molekula, amely kifejezetten a STAT fehérjék kovalens gátlásával akadályozza meg a rákos sejtek további növekedését [2], így kutatócsoportunk célul tűzte ki az ilyen jelöltek azonosítását.

A munka során elsőként molekulakönyvtárak dokkolásával 41 nem-kovalens fragmens vegyületet azonosítottunk a STAT5b fehérjével szemben, melyeket további biológiai szűrésnek vetettünk alá. A biológiai mérésekhez fluoreszcens polarizációt alkalmaztunk, amellyel tovább szűkítettük a potenciális fragmensek körét. A szűrés során a leszűkített találatokban szerkezeti hasonlóságot fedeztünk fel, vagyis többekben is megjelent a szalicilsav szerkezete. Ezen felismerés alapján fluoreszcens polarizáció assay-vel leszűrtük a kutatócsoportunkban található savmimetikumokat tartalmazó fragmenskönyvtárat is, amelynek eredményeképpen további találatokat kaptunk.

A molekulatervezés következő fázisában kiindulópontnak kiválasztottuk a Stafib-1 nevű molekulát, amely *in vitro* sejtes vizsgálatokban jó eredményt mutatott a célfehérjével szemben [3]. A Stafib-1 molekulán található foszfátcsoportot elsőként virtuálisan lecseréltük a savmimetikum könyvtár találataira különböző kapcsolódási módokkal, majd dokkolás segítségével kiválasztottuk a legígéretesebb vegyületeket. Ezek egy részét kiválasztottuk szintézisre, biológiai vizsgálatukat a közeljövőben tervezem elvégezni.

[1] J. Bromberg et al: *Oncogene*, **2000** (19), 2468-2473.

[2] A. Orlova et al.: *Cancers*, **2019** (11), 1930.

[3] N. Elumalai et al: *Angew Chem Int Ed Engl* **2015** (16), 4758-4763.

Köszönetnyilvánítás: Szeretném megköszönni az említett társszerzőknek a szakmai támogatását, valamint Szadai Barnabás hallgatónak a szintézisekbe fektetett munkáját.

AKR1C enzimcsalád biológiai funkciója és inhibitorai

Csengeri Ágnes^{a,b}, Mernyák Erzsébet^{a,b}

^aSzegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Molekuláris és Analitikai Kémia Tanszék, 6720 Szeged, Dóm tér 7-8.

^bSzegedi Tudományegyetem, Gyógyszertudományi Kar, Farmakognózi Intézet, 6720 Szeged, Eötvös u. 6

A rákos megbetegedések bárhol jelentkezhetnek az emberi szervezetben. Ezek akkor alakulnak ki, amikor a test sejtjeinek rendezett növekedési és osztódási folyamata megbomlik. Az ösztadiol női nemi hormonként szerepet játszhat a daganatos betegségek kialakulásában is azáltal, hogy elősegíti a sejtek reprodukcióját. Az ösztadiol szervezetben való képződésének megakadályozása daganattellenes stratégiát jelenthet. Kutatócsoportunk a közelmúltban igazolta, hogy az ösztadiol előanyagának, az ösztroinnak vázmódosításával olyan származékokhoz juthatunk, amelyek képesek blokkolni az ösztadiol bioszintézisét elősegítő enzimeket, ide tartoznak az AKR1C enzimcsalád egyes tagjai is. Az ösztroinváz aromás A- gyűrűjének halogénezésével előállított vegyületek között hatékony AKR1C gátlókat azonosítottak, esetenként magas szelektivitással [1].

Munkánk célja a fenol-jellegű aromás gyűrű szubsztituálása volt, C–H aktiválási reakciók végrehajtásával. Korábban egy fenol hidroxilezése nagy kihívásokat rejtett. A régi eljárások a környezetre és az egészségre ártalmas reagenseket használtak. Az utóbbi évtizedben jelentős előrelépés történt ezen a területen. Az újonnan kifejlesztett katalitikus eljárások lehetővé teszik fenolok hatékony hidroxilezését ruténium-katalizátor alkalmazásával. Ehhez irányítócsoporthoz beépítésére van szükség, amely általában karbamát vagy nitrogéntartalmú heterociklus. Munkám során karbamoil, piridil illetve ez utóbbi szubsztituált származékait választottuk, olyan szubsztituensekkel, amelyek biológiai szempontból ígéretesek lehetnek. Sikeresen beépítettük az irányító csoportokat a vázmódosított ösztroin származék fenolos hidroxilcsoportjára, és *orto*-helyzetű hidroxilezést hajtottunk végre. Az újonnan előállított vegyületek között hatékony AKR1C gátlókat azonosítottunk.

[1] M. Sinreih, R. Jójárt, Z. Kele, T. Büdefeld, G. Paragi, E. Mernyák & T. L. Rižner: *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, **2021** (36:1), 1500 – 1508.

Köszönjük az NKFIH OTKA SNN 139323 támogatását.

Apremilast gyógyszerhatóanyag-szintézis kulcsfontosságú intermedierének rezolválása

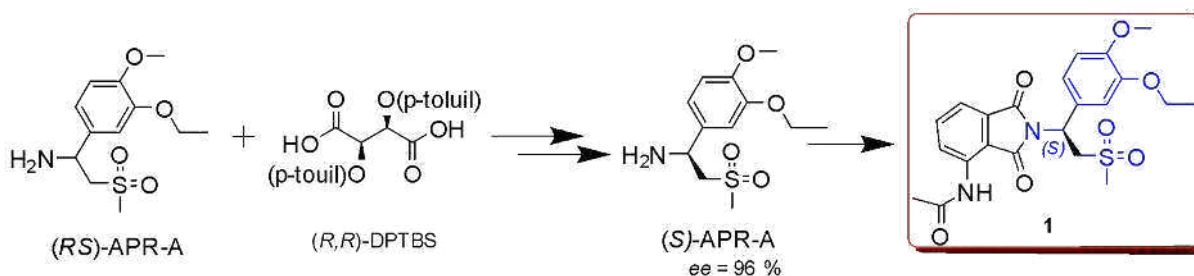
Nguyen Thuy Hong Ha^a, Dr. Mátravölgyi Béla^b

^a Budapest Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest
Budafoki út 8

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

Napjainkban a kismolekulás gyógyszerhatóanyagok körülbelül ötven százaléka rendelkezik aszimmetria centrummal [1]. A gyógyszeriparban a sztereoizomerek szétválasztása, külön-külön tiszta formában történő nagytisztaságú előállítása és részletes vizsgálata alapvető feladat. Erre a célra ma már számos technológiai módszer ismert. Közülük is gyógyszeripari környezetben a leggyakrabban alkalmazott módszer a diasztereomersópár-képzésen alapuló rezolválás.

Kutatócsoportunkban az elmúlt években gyógyszeripari megbízások és alapkutatási projektek keretében számos diasztereomersópár-képzésen alapuló rezolválási eljárást fejlesztettek ki. Egyike ezeknek az Apremilast gyógyszerhatóanyag (APR) kulcsfontosságú intermedierének az APR-A, primer-amin-származéknak a racém keverékből történő kinyerése [2]. Az APR hatóanyag kívánt biológiai hatás kiváltására kizárólag az *S*-enantiomer rendelkezik. Az APR kereskedelmi forgalomban Otezla gyógyszer néven található meg, melynek kiemelkedő jelentősége van az arthritis psoriatica, psoriasis és a Behcet-kór kezelésekor [2]. Kutatómunkám céljából, az APR-A intermedier enantiomereinek szétválasztására alkalmas rezolválóágensek körének kibővítése, és a nem hasznos enantiomer további hasznosítási lehetőségének vizsgálata. Hatékony rezolválószernek az (*R,R*)-di-para-toluil-borkösavat (DPTBS) találtam, mely könnyen hozzáférhető és ipari környezetben is használható, könnyen regenerálható. Kísérleti munkámban az eljárás különböző meghatározó paramétereinek felderítésére és optimalizálására fókuszáltam. Eredményül egy olyan kristályosításon alapuló rezolválási eljárást fejlesztettünk, mellyel magas enantiomertisztasággal (*ee* 96%) és jó termeléssel kapható meg a kívánt enantiomer. Ezen felül további vizsgálatokat végeztem az APR-A rezolváló ágensként való hasznosítására, elsősorban atropizomer vegyületek enantiomereinek elválasztásában. Rezolválószerként való hasznosításban egy fenil-pirrol alapvázú, primeramid- és karboxil-csoportokat tartalmazó atropizomer vegyület (CF₃-CPBA) esetén értem el kimagasló eredményeket.



[1] E. Francotte: *LCGC Europe* 29 (suppl), **2016**, 31-37.

[2] F. Faigl, J. Doubsky, R. Klvana, J. Richter, E. Fogassy, B. Mátravölgyi, Á. Mízsák, *W0216161996A1 patent*, **2016**

Ezúton szeretném megköszönni a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak a kutatás anyagi támogatásáért.

2-Azidopridin és rokon vegyületeinek gyors és biztonságos áramlásos kémiai szintézise és tovább alakítása

Szemesi Péter^a, Bana Péter^b, Szakács Zoltán^b, Greiner István^b, Éles János^b

^aSzerves Kémia és Technológia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Műegyetem rkp. 3., H-1111 Budapest

^bRichter Gedeon Nyrt., Pf. 27, H-1475 Budapest

Az aril-azidok laboratóriumi körülményke között széles körben használt reagensek, többek között a Huisgen-cikloaddíciónak vagy a Staudinger-ligációnak is fontos kiindulási vegyületei. Ezzel szemben nagyobb mértékű ipari felhasználásukra csak ritkán találunk példát, amely elsősorban robbanékonyságuknak köszönhető. Az aril-azidok egy ritkában vizsgált családja az *N*-heteroaromás azidok, melyek a magas nitrogén tartalom miatt fokozott robbanás veszélyt jelentenek. Habár egy áramlásos kémiai rendszer alkalmas lenne az említett veszélyek kezelésére az irodalomban idáig erre csak kevés példa található. Munkánk során először írtuk le *N*-heteroaromás azidok áramlásos kémiai szintézisét [1].

Az azidok előállítása a megfelelő aril-hidrazinból savas közegben NaNO₂-tel történt egy diazotálási reakcióban. Első körben a reakciót áramlásos körülmények között optimalizáltuk a 2-azidopiridin modellvegyület segítségével. A kezdeti ecetsav helyett sósavat alkalmazva és a körülmények megvizsgálásával sikerült mind off-line, mind in-line extrakcióval 90% feletti termelést elérni. A reakciót ezt követően kiterjesztettük szubsztituált 2-azidopiridinekre, illetve 2-azidoprimidinekre is, a legtöbb esetben 80% feletti termeléssel.



Végezetül a rendszert összekötve egy második reaktorban trifenilfoszfin-oxid segítségével megvalósított Staudinger-reakcióval, megmutattuk, hogy a modul alkalmas nagy mennyiségű folytonosan előállított és egyből tovább alakított azid biztonságos kezelésére is.

ANYAGTUDOMÁNY SZEKCIÓ I.

Pszeudo-perovszkit vékonyréteg szerkezeti és optoelektronikai tulajdonságainak finomhangolása halogéncserével

Hajdu Cintia^a, Samu Gergely Ferenc^a, Janáky Csaba^a

^aSzegedi Tudományegyetem Fotoelektrokémiai Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Az ólom-halogenid típusú perovszkitokat és analóg vegyületeiket nagy érdeklődés övezi a fény-energia átalakítás területén, de a stabilitás hiánya jelenleg is nagy probléma. Érzékenyek nedvességre, fényre és hőre, valamint az ólomtartalom miatt környezetkárosítóak. Ezen 3D-s anyagokból származtathatóak a perovszkit rács kristallográfiai síkjai mentén történő darabolással az alacsony dimenziójú (egy és nulladimenziós) pszeudo-perovszkitok. A dimenzionalitás csökkentésével növelhető ezen anyagok stabilitása. [1] Ide soroljuk a $\text{Cs}_3\text{Cu}_2\text{X}_5$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) összetételű anyagsaladót, melyek eltérnek kristályszerkezetükben az általános ABX_3 (vagy ekvivalens sztöchiometriájú) képlettel leírható perovszkitoktól.

A cézium-réz halogenidek a környezetre kevésbé káros elemekből épülnek fel. Ezen felül az optoelektronikai tulajdonságaik hangolhatók az összetétellel. [2] Mindemellett egyszerűen és költséghatékonyan előállíthatók oldatkémiai eljárásokkal. Fény-gerjesztéssel könnyen torzítható a kristályrácsuk és a folyamat következtében alacsonyabb energaszinten csapdázott excitonok alakulnak ki bennük. Rekombináció során az emittált fény alacsonyabb energiájú tartományba esik (Stokes-eltolódás), mint ami a gerjesztéséhez szükséges, így a minta nem nyeli el az általa emittált fényt. Előnyös tulajdonságaiknak köszönhetően az anyagsalád fényemittáló-diódák, fotodetektorok, szcintillátor-ernyők és töltéssel rendelkező részecske detektorok potenciális alkotójaként került a figyelem középpontjába. [3]

Munkánk során 10 μm vastag $\text{Cs}_3\text{Cu}_2\text{Br}_5$ rétegeket állítottunk elő oldatporlasztásos technikával, majd ezeket CsI oldatba merítettük. Bizonyítottuk a bromid-jodid halogéncserét pszeudo-perovszkit polikristályos anyagokra. Vizsgáltuk a CsI koncentráció és az áztatási idő hatását az így kezelt rétegek morfológiai és összetételbeli változásaira, melyeket különböző anyagvizsgálati módszerekkel követtünk. Előadásom során továbbá bemutatom a rétegekben bekövetkező halogéncsere hatását azok fényemissziós sajátságaira, mely lehetőséget teremt azok finomhangolására.

[1] M. Li, Z. Xia et al.: *Chem. Soc. Rev.*, **2021** (50), 2626-2662.

[2] G. F. Samu, T. S. Zsigmond, C. Hajdu, M. Hunyadi, L. Csige, A. Csík, J. Kopniczky, B. Hopp, Cs. Janáky et al.: *Adv. Optical Mater.*, **2023** (2300825), 1-9.

[3] M. Hunyadi, G. F. Samu, L. Csige, A. Csík, Cs. Buga, Cs. Janáky et al.: *Adv. Funct. Mater.*, **2022** (2206645), 1-9.

Üvegszálak regenerálása üvegszálak kompozitból hidrotermális bontással

Képes Bence, Kántor Petra, Székely Edit

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Az üveg-, fém-, és szénszállal módosított kompozitokat alkalmazza az építőipar, járműipar de az energiaszektor is erőszertetl használja őket jó mechanikai tulajdonságaik miatt, azonban a tervezett felhasználásuk után jellemzően hulladéklerakóba kerülnek. Az Európai Unió, és így Magyarország kiemelt célja is a Zöld Megállapodás keretein belül a hulladék kibocsátás jelentős csökkentése és a körforgásos gazdaságra való áttérés. Megoldandó problémaként merül fel a kompozitok kezelése, feldolgozása, lehetőleg anyagukban történő újrahasznosítása életciklusuk végén. A fizikai újrahasznosítási módszerek a kompozitok esetében nem általánosan használhatóak, hiszen a kompozitok létrehozását valamely speciális követelménynek való megfelelés indokolja. A fizikai újrahasznosítás alacsony költségű, de sok esetben túlságosan specifikus, vagyis a feldolgozási módszer, illetve maga a feldolgozhatóság függ a polimer anyagi minőségétől, adalék-, és segédanyagaitól is, így az alkalmazási köre limitált. Az ígéretesebb legelterjedtebb feldolgozási módszerek közé tartozik a pirolízis is, aminek azonban nagy hátránya, hogy a szálakkal erősített kompozitok esetében a magas hőhatás, illetve a folyamat során keletkezett, a szálra ráégett termékek, negatívan hatnak a szál mechanikai tulajdonságaira. Ez gátolja annak felhasználhatóságát, illetve további tisztítási lépések válnak szükségessé [1]. Ekkor szolgálhat jó megoldással a hidrotermális bontás, ami, például a pirolízisnél alacsonyabb hőmérsékleten, környezetkímélően nyújthat lehetőséget a kompozitok részleges bontására. Munkánk célja az üvegszálak kinyerése az üveg újrahasználhatóságának érdekében. A szubkritikus hidrolízis előnye, hogy nem alkalmaz mást, mint a vizet, ami olcsó, könnyen hozzáférhető, nem mérgező és környezetbarát, valamint szub-, és szuperkritikus körülmények között számos olyan tulajdonság elérhető, ami elősegíti a bevonatként használt polikondenzációs polimerek bontását [2].

Méréseink során egy fél folyamatos rendszerben, szubkritikus vízzel ($T_c=374\text{ °C}$, $p_c=22\text{ MPa}$) bontottunk egy adott üvegszálak kompozitot katalizátor nélkül. Elmondható, hogy a vizsgált paraméterek (nyomás és hőmérséklet) közül a bontásra jelentős mértékben csak a hőmérséklet van hatással, ami befolyásolta a reakcióidőt és a keletkező folyadéktermék kémhatását, illetve az üvegszálak állapotát, melyet pásztázó elektron mikroszkóppal (SEM) vizsgáltunk.

[1] B. Bai et al.: *Waste Management*, **2019** (89), 247-253

[2] I. Okajima et al.: *Polymer Degradation and Stability*, **2019** (162), 22-28

A 2019-1.3.1-KK-2019-00004 számú projekt a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból biztosított támogatással, a 2019-1.3.1-KK pályázati program finanszírozásában valósult meg. A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-23-6-II-BME-477 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Funkcionális molekulák vizsgálata pumpa-szonda szórási kísérletekkel ultragyors időskálán

Mikeházi Antal János^a, Németh Zoltán^a, Vankó György^a

^a*Wigner Fizikai Kutatóközpont, RMI, NAO Femtoszekundumos Spektroszkópia és Röntgenspektroszkópia
"Lendület" Kutatócsoport*

A dolgozat témája funkcionális molekulák, vas(II)-bisz-terpiridin ($[\text{Fe}(4'\text{-R-2,2':6',2''}\text{-terpiridin})_2]^{2+}$ molekulaion) és annak 4' pozícióban szubsztituált származékainak vizsgálata optikai pumpa - röntgenszonda kísérleti módszerrel. A dolgozat célja különböző anyagi tulajdonságok, de elsősorban két fontos paraméter meghatározása mind az alaprendszer a vas(II)-bisz-terpiridin minta, mind a vizsgált származékai esetében. A két kiemelten követett paraméter a gerjesztett állapot és az alapállapot energiakülönbsége (ΔE), valamint a gerjesztett kvintett állapot élettartama (τ). Míg az élettartamokat más kísérleti módszerrel (laboratóriumi tranziens optikai spektroszkópia) is meg lehet határozni, az energiakülönbségre csak elméleti úton kapott érték áll rendelkezésünkre.

Az ESRF harmadik generációs szinkrotronban időfelbontott röntgen oldatszórás (*Time Resolved X-ray Solution Scattering*, TR-XSS) méréseket végeztem. A mérési eredményeket a mérés után rögtön redukáltuk (maszk, detektorkorrekciók, azimutális integrálás), ezzel az adatsorokat kezelhetővé téve a részletesebb analízis számára. A második fázisban először egy részletes adatszűrést, skálázást és normalizálási folyamatot, majd pedig a több, egymásra épülő modell illesztését végeztem el.

Végül az illesztett modellel a kívánt paraméterek meghatározhatók. A szubsztituálatlan vas(II)-bisz-terpiridin alaprendszer esetén a τ és ΔE paraméter a korábbi más típusú mérésekből, számításokból származó eredményekkel konzisztens, azonos eredményt hozott. A többi minta esetében az élettartamok egy kiugró esettől eltekintve jól meghatározhatók, viszont a ΔE paraméter meghatározása az alaprendszeren kívül a többi minta esetén nem kielégítő. Emiatt egyrészt további munkával az illesztések esetleg javíthatók, másrészt további kísérletek szükségesek az elégtelen mérési adatok pótlására.

Radioaktív hulladékok kondicionálására alkalmas metakaolin alapú és tartalmú kötőanyagok NMR relaxometriás vizsgálata

Kertész Tamás Péter^{a*}, Papp Vanda^{a,b}, Kéri Mónika^a

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen Egyetem tér 1.

^b Isotoptech Zrt., 4026 Debrecen Bem tér 18.

*tamaskertesz07@gmail.com

Napjainkban a kis- és közepes aktivitású hulladékok kondicionálására Magyarországon metakaolin tartalmú Portland cementet alkalmaznak. [1] Azonban vannak olyan radioaktív hulladéktípusok, mint például szerves anyag tartalmú hulladékok vagy ioncserélő műgyanták, amelyek szilárdítására a cement alapú kötőanyagok nem alkalmasak. Így az utóbbi időkben világszerte előtérbe került a geopolimer alapú kötőanyagok fejlesztése. A tartós tárolás érdekében fontos paraméter a megkötött hulladék csomag porozitása, és vízzel való kölcsönhatása. Ezek roncsolás mentes vizsgálatára alkalmasak a különböző mágneses magrezonancia alapú technikák. Munkám során radioaktív hulladék szilárdítására alkalmas kötőanyagok és kompozitjaik porózus szerkezetét vizsgáltam NMR relaxometriás módszerrel. Az NMR relaxometria alkalmasnak bizonyult a pórusos szerkezetben lévő különböző mobilitású vízdomének jellemzésére és ezen keresztül a különböző kötőanyagok összehasonlítására és érési folyamatuk követésére. [2,3,4]

Munkám során a metakaolint egyrészt, mint kötőanyagot, másrészt mint adalékanyagot vizsgáltam. A kötőanyag-fejlesztés során elsőként kiválasztottam azt a receptet, mellyel a legjobb fizikai tulajdonságú geopolimer állítható elő. Relaxometriás eredmények alapján megállapítottam, hogy 0,5-0,7 víz – szilárdanyag tényező mellett a minták porozitása jelentősen nem változik, így ezek középső értékével dolgoztam az érési folyamat vizsgálata során. NMR relaxometriával jól követhető volt az érési folyamat 3 lépése, mely során kialakul a geopolimer, majd a víz kondenzációját követően a végső pórusszerkezet.

Ezt követően a metakaolint, mint adalékanyagot adtam különböző mennyiségben a tiszta Portland cementhez. Azt tapasztaltam, hogy 20-30% metakaolin hozzáadása kedvezően hatott a kialakult metakaolin – cement kompozit szerkezetére. A 20%-os metakaolin tartalmú minta érési folyamatát összehasonlítottam a tiszta Portland cement és a geopolimer érésével. Kompozit esetén jól látható, hogy a metakaolin a puccolános reakciója révén beépül a cement CSH gél részébe, mely egy kompaktabb struktúrát eredményez. Ezek az eredmények jó alapot szolgáltatnak a radioaktív hulladékok szilárdítására alkalmas kötőanyagok további fejlesztéséhez, azok szerkezetének és érési folyamatainak ismerete révén.

Hivatkozások:

- [1] J., Kořátková et al.: *Journal of Environmental Radioactivity* **2017**, 178-179, 147-155.
- [2] V., Papp et al.: *Journal of Molecular Liquids*, **2023**, Vol. 388, 122716
- [3] J., Li et al.: *Cement and Concrete Research*, 143, **2021**, 106394.
- [4] Cao, Ruilin et al.: *Composites Part B: Engineering*, Volume 242, **2022**, 110025.

Köszönetnyilvánítás:A kutatás a Kooperatív Doktori Program (KDP-2021, Papp.V) pályázat keretein belül valósult meg az Innovációs és Technológiai Minisztérium és a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap támogatásával. A kutatás konferencián való megjelenését támogatta a DETEP (Debreceni Egyetem Tehetséggyógyozó Programja)

GYÓGYSZERANALITIKAI KÉMIA SZEKCIÓ

Filmtabletták minőségellenőrzése közeli infravörös és Raman-spektroszkópia segítségével

Szabó Bence

Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

Az utóbbi évtizedben egyre nagyobb figyelmet kapnak a folyamatkövető és folyamatelemző technológiák (process analytical technology, PAT), melyek eszközei a folyamatmonitorozó mérőrendszerek és az összegyűjtött adatok elemzésére szolgáló többváltozós adatelemző módszerek. Célja a kiváló termékminőség biztosítása, a kritikus folyamat paraméterek kézben tartása és a különböző gyártási körülmények szabályozása.

A tablettázás és a filmbevonás folyamata egy gyakran alkalmazott művelet a gyógyszeriparban. A gyártás során a termékek vizsgálata kulcsfontosságú annak érdekében, hogy megfelelő minőségű készítmények kerüljenek forgalomba.

Munkám célja olyan parciális legkisebb négyzetek módszerén (Partial Least Squares, PLS) alapuló modellek létrehozása, amelyek lehetővé teszik a legyártott tabletták hatóanyag-tartalmának becslését, illetve a filmbevonás során bekövetkezett tömegnövekedés meghatározását valós időben spektroszkópia segítségével. A modellek felépítéséhez először különböző koffein hatóanyagú tablettákat készítettem, majd elvégeztem azok filmbevonását. A bevonás alatt bizonyos időközönként mintát vettem, összesen 280 db tablettát, amelyeket NIR- és Raman-spektroszkópiai méréseknek vettem alá. Mindkét spektroszkópia esetén elvégeztem a méréseket reflexiós és transzmissziós üzemmódban is azért, hogy meghatározzam melyik mérési elrendezés a legalkalmasabb az említett paraméterek vizsgálatára, ezáltal a gyártási folyamat nyomon követésére. A PLS modellek felépítéséhez 210 db tablettára végeztem méréseket, az eredményeiket a kalibrációhoz használtam, a megmaradt 70-et pedig az elkészült modellek teszteléséhez. A teszt tabletták hatóanyag-tartalmát UV-spektroszkópiás mérés segítségével határoztam meg.

A kidolgozott matematikai modellek sikeresnek bizonyultak a koffeint tartalmazó filmtabletták minőségellenőrzésére. A hatóanyag-tartalom becslésére készült modellek közül a NIR-transzmissziós modell volt a legalkalmasabb, a bevonás során bekövetkező tömegnövekedés becslésére pedig a NIR-reflexiós modell bizonyult a legjobbnak.

UV képképzésen alapuló gépi látási rendszer alkalmazása tabletták vizsgálatára

Mészáros Lilla Alexandra^a, Dr. Farkas Attila^a, Dr. Nagy Zsombor Kristóf^a

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

Napjainkban az egyre fejlődő technológiai környezetben az innovációnak és a modernizációnak a gyógyszeriparban is kiemelt szerepe van. A gépi látás megjelenése hozzájárulhat a minőség biztosításához, a folyamatok követéséhez és mélyebb megértéséhez, vagy akár a döntéshozatalhoz. Ezzel összhangban kiemelt jelentősége lehet a digitalizációs törekvésekben és az Ipar 4.0 koncepciójában. Jelenleg egyre nő az érdeklődés a folyamatos technológiák alkalmazása, megvalósítása iránt, melyhez olyan analitikai eszközök szükségesek, amelyek a folyamatfelügyelő és elemző rendszerekbe (PAT) integrálhatók, illetve támogatják a termékbe tervezett minőség (QbD) koncepciójának megvalósulását.

A szilárd gyógyszerformák minőségének ellenőrzése és biztosítása hagyományosan offline, munkaigényes, lassú, destruktív módszerekkel történik, melyek a folyamatok valós időben történő követésére nem alkalmazhatók. A gépi látási rendszerekhez alkalmazott VIS és UV_{380-395nm} megvilágítások sikeresnek bizonyultak szilárd gyógyszerformák vizsgálatára. A megvilágítás hullámhossztartományának megváltoztatásával a rendszer alkalmazási területei kiterjeszthetők lehetnek egyéb hatóanyagok és segédanyagok vizsgálatának irányába.

Az előadásom során egy általam fejlesztett gépi látást alkalmazó rendszer kerül bemutatásra, melyben a megvilágítást a VIS és az UV_{380-395nm}-en kívül, egy UV_{250-280nm} lámpa biztosította. A vizsgálandó carvedilol és laktóz tartalmú minták esetében a préserő és a törési szilárdság mellett, a hatóanyag-tartalom és az *in vitro* kioldódás kvalitatív és kvantitatív predikcióját valósítottam meg kizárólag képek alapján. A képek által hordozott információ kinyerését követően a létrehozott adatkészleteket mesterséges neurális hálózatokon alapuló modellek felállítására használtam fel.

Az előállított minták tekintetében az UV_{250-280nm} megvilágítás jelentős információt hordoz a hatóanyag-tartalom egységességéről, vagy akár annak szemcseméretéről. UV_{380-395nm} megvilágítással leginkább a mátrixról kaphatunk információt. VIS tartományban a tabletták felületi strukturaltságával összefüggésbe hozható paraméterek vizsgálhatók.

Aripiprazol tartalmú készítmények bioekvivalencia vizsgálatának predikciója kioldódás-felszívódás alapon

**Kádár Szabina^a, Lee Samuel^b, Ruiz Rebeca^c, Farkas Attila^a, Nagy Zsombor Kristóf^a,
Borbás Enikő^a, Sinkó Bálint^c**

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

^bPion Inc., Forest Row Business Park, Forest Row RH18 5DW, UK

^cPion Inc., 10 Cook Street, Billerica, MA 01821, USA

A generikus készítményfejlesztés egyik legnagyobb kihívása a készítmény megfelelő teljesítése a bioekvivalencia vizsgálat során. Az *in vivo* kísérleteket megelőző *in silico* és *in vitro* vizsgálatok segíthetnek ennek előrejelzésében, azonban ezek hatékonysága még távol áll a 100%-tól. Az elmúlt években számos eszköz került kifejlesztésre a jobb *in vivo* viselkedés predikciójára. Ezen készülékek viszont jellemzően csak egy adott típusú készítmény mérésére alkalmasak, így ennek megfelelően napjaink kihívása a már meglévő készülékek *in vivo* előrejelzési képességének kiterjedt validálása.

Így vizsgálataink tárgyát képezte, hogy előrejelzési potenciáljukat tekintve összehasonlítsuk a kis térfogatú fluxus vizsgálatokat a kétfázisú kioldódással végzett mérési eredményekkel 6 aripiprazol tartalmú forgalomba hozott generikus készítmény bioekvivalenciájára vonatkozóan. A munka során vizsgáltuk és összehasonlítottuk ezen eszközök alkalmazhatóságát a készítmények különböző minta-alkalmazásainak vizsgálatára, valamint különböző értékelési módszerek alkalmazásával kiválasztottuk az optimális értékelési módszert. Végül az

in vitro-in vivo korreláció javítása érdekében elsőként integráltuk az *in vitro* mért fluxus profilokat egy új „GUT framework”-ön (Gastrointestinal Unified Theoretical) alapuló matematikai modellbe, ezáltal prediktáltuk az abszolút felszívódott hányad értékeit, amelyeket összevetettünk az *in vivo* humán adatokkal.

A mérési eredmények egyértelműen rámutattak arra, hogy sem a kistérfogatú fluxus vizsgálat sem a kétfázisú kioldódás nem bizonyult alkalmas módszernek a bioekvivalencia előrejelzésére, viszont a csökkentett dózis alkalmazása jelentősen javította a predikciót. Az értékelési módszerek összevetése során azt tapasztaltuk, hogy ha a hatóanyag donor oldali kicsapódása nagymértékű, az értékelési módszer kiválasztása befolyásolja a bioekvivalencia előrejelzését. Összességében megállapítható, hogy a fluxus alapú előrejelzések pontosabbnak bizonyultak, mint a görbe alatti terület (AUC) alapú előrejelzések, mivel ezen értékelés esetén több készítmény alulprediktálnak bizonyult még a csökkentett dózis mérések esetében is.

Az *in silico* szoftverrel történő predikció során is hasonló tendencia vonható le, hiszen a teljes dózis mérések alkalmazásával számított felszívódott hányad értékek a legtöbb készítmény esetében túljósolták az *in vivo* felszívódott hányadot. A csökkentett dózis felszívódási profilok használatával már szignifikánsan javult az *in silico* és *in vivo* felszívódott hányad értékek közötti korreláció, hiszen a számított értékek a +/- 15%-os elfogadási tartományba esett az *in vivo* adatokkal való összehasonlítás során.

A kutatás a Kulturális és Innovációs és Minisztérium ÚNKP-23-3-II-BME-88 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.”

Felületaktív anyagok és pH-módosító segédanyagok hatása a pimobendán kioldódására és felszívódására

Tózsér Petra^a, Kovács Luca L.^a, Kádár Szabina^a, Csicsák Dóra^b, Sóti Péter^c, Völgyi Gergely^b, Sinkó Bálint^d, Nagy Zsombor Kristóf^a, Jaksáné Borbás Enikő^a,

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

^b Semmelweis Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Intézet, 1092 Budapest, Hőgyes Endre u. 9.

^c Lavet Gyógyszeripari Kft., 2143 Kistarcsa, Batthyány u. 6.

^d Pion Inc., USA, Billerica MA,

Napjainkban a gyógyszeripari kutatások egyik fő kihívása a fejlesztésben lévő és a piacra vitt hatóanyagok tulajdonságainak változásából adódik, ugyanis a rossz vízoldhatóságú hatóanyagok aránya rohamosan növekszik. A készítményfejlesztés során kiemelt feladat a rossz vízoldhatóságú hatóanyagok biohasznosulásának növelése, mely területen ígéretesnek bizonyuló technológiákban felhasznált segédanyagok (pl. pH-módosítók, felületaktív anyagok stb.), nemcsak a hatóanyag kioldódását segítik, de a hatóanyag permeabilitására is hatással vannak. Ennek a felismerésnek köszönhetően napjainkban a segédanyagok kioldódás-felszívódás profilra gyakorolt hatásának *in vitro* modellezése nagy érdeklődésre tart számot.

Kutatómunkám során állatorvosi használatra szánt generikus készítményekben használt kioldódást növelő segédanyagok kioldódásra és felszívódásra gyakorolt hatását vizsgáltam. Céljaim megvalósítása érdekében a BCS II osztályba tartozó, rossz vízoldhatóságú pimobendánt választottam modell hatóanyagként, melynek oldhatóságát és permeabilitását felületaktív anyagok és pH-módosító segédanyagok jelenlétében vizsgáltam. Továbbá két állatgyógyászatban alkalmazott pimobendán tartalmú generikus készítményt, amelyek egyikében felületaktív anyagokkal, a másikkban pedig pH-módosító ágenssel segítette a gyártó a kioldódást, *in vitro* szimultán kioldódás-felszívódás vizsgálatoknak vetettem alá. Vizsgálataim során a különböző segédanyagok esetében eltérő oldhatóság növelő és ezzel egyidőben permeabilitás csökkentő hatásokat figyeltem meg, amelyek többsége szignifikánsnak bizonyult [1].

[1] Tózsér, P.; Kovács, L.L.; Kádár, Sz.; Csicsák, D.; Sóti, P.; Völgyi, G.; Borbás, E.; Nagy, Z. K.; The effect of surfactants and pH modifying agents on the dissolution and permeation of Pimobendan. *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*, **2023**. 67(1), pp. 1–10, <https://doi.org/10.3311/PPCh.20970>

ANYAGTUDOMÁNY SZEKCIÓ II.

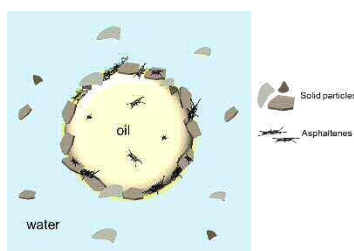
Az aszfaltének szerepe a kőolaj emulziók stabilitásában

Ördög Tibor István¹, Balassa Lilla², Puskás Sándor¹, Dékány Imre²

¹MOL Nyrt. Csoportszintű Olajipari Fejlesztések és Megoldások

²SZTE TTIK Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szeged

A természetben előforduló kőolajban nagy molekula súlyú szerves vegyületek vannak az olajos fázisban, míg a kőolaj másik fázisa vizes közegű, amelyben elektrolitok (kalcium, magnézium sók, vízben oldható szerves anyagok) találhatók. Az olaj-víz aránytól függően o/v (olaj a vízben) és v/o (víz az olajban) diszperziókat találunk. Ebben a munkában az o/v típusú emulziókban előforduló és az olajos fázisban oldott aszfaltének szerepéről számolunk be abból a célból, hogy felvilágosítást kapjunk a szerves fázisban oldott aszfaltén stabilizáló hatásáról. Meg kell jegyezni, hogy a diszperziós közegként szereplő vizes fázisban az elektrolitok mellett a tároló közetből – a közetbeli áramlások által kisodort – homok és agyag részecskék is találhatók, amelyek szintén befolyásolják a kőolaj emulzió stabilitását. A stabilitás vizsgálata azért fontos, mert a felszínre került kőolaj emulziót az olajfinomítóba küldés előtt szeparálni kell olajos és vizes fázisra. Ebben a szeparációs technológiában fontos szerepe van az o/v határfelületen létrejövő stabilizáló rétegnek, amely aszfalténből, aszfaltén által módosított ásványos részecskékből áll [1]. Az alábbiakban bemutatott sematikus 1. ábra mutatja a feltételezett un. Pickering-típusú emulzió csepp határfelületi rétegének szerkezetét. Ebben a munkánkban abban akarunk felvilágosítást adni, hogy az ásványos komponenseken adszorbeált aszfaltén mennyisége milyen mértékben befolyásolja az emulzió stabilitását, ill. a tenzidek adagolása, - amelyek a kőolaj termelési technológiákban elengedhetetlen – hogyan befolyásolja az ásványos közeten ill. az aszfalténnal módosított közeten a tenzidek adszorpcióját. Ennek ismerete azért fontos, mert a tenzidekkel történő kőolaj kiszorítási technológiáknál ismerni kell a besajtolt tenzidoldatokból történő adszorpciós folyamatokat a tároló réteg közetpórusaiban. Ez azt jelenti, hogy szilárd-folyadék határfelületen bekövetkező tenzidadszorpciós folyamatokat tanulmányozunk és annak kvantitatív tanulmányozása érdekében tenzidadszorpciós izotermákat határoztunk meg nátrium-dodecylbenzol-szulfonát (NaDBS) anionos tenzidet alkalmazva. Kvantitatív információkat fogunk adni az adszorpciós kapacitás és az adszorpciós mechanizmusról a tároló közet ill. az emulziót stabilizáló részecskék felületéről.



1. ábra

Megállapítottuk, hogy a részecskék felületén előzetesen és növekvő mennyiségben adszorbeált aszfaltén növeli a kőolaj kiszorításhoz szükséges tenzid mennyiségét. A gyakorlati alkalmazás során a tenzid adszorpció ismerete azért fontos, mert hatással van a kőolaj kitermelésének költségeire.

Irodalom:

[1] Á. Patzkó, I. Dékány: Colloids and Surfaces, 1993 (71), 299-307

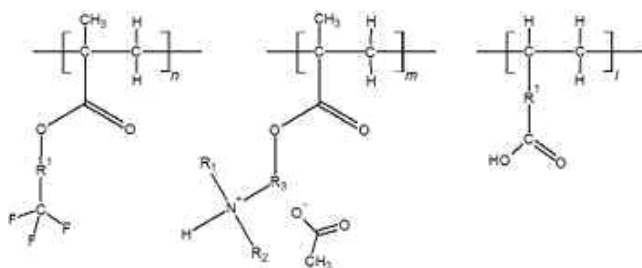
Polimer adalékok szerepének vizsgálata elektrokémiai szén-monoxid redukcióban

Galbicsek Noémi Vanda^a, Kormányos Attila^a, Janáky Csaba^a, Endrődi Balázs^a

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

Napjainkban egyre aktuálisabb témává válik az emberi tevékenység során termelt CO₂, valamint az ebből képzett CO elektrokémiai redukciója. Ezen folyamatok ipari technológiáik közé vezetése által a légkörbe jutó CO₂ mennyisége csökkenthetővé válna. A CO₂ kételektronos, szén-monoxidhoz vezető redukciója mára már nagy szelektivitással és sebességgel kivitelezhető. Azonban a CO redukciója számunkra értékes termékekké (CH₄, C₂H₄...) - ígéretessége ellenére - lényegesen kevésbé megértett és alkalmazott terület. Mind a szelektivitás, mind a maximális energiahatékonyság és reakciósebesség elérése optimalizálandó terület.

Gázfázisban nagy reakciósebesség érhető el, ennek megvalósításához a legalkalmasabb megoldások között szerepel a gázdiffúziós elektródok alkalmazása. Ezek egy porózus hordozóból állnak, melyen a katalizátorréteg helyezkedik el. A szakirodalomban fellelhető közleményekben a szén-monoxid elektrokémiai redukcióját szinte kizárólag az általunk is

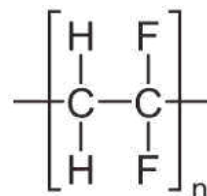


használt, nanoméretű tartományban lévő réz katalizátor alkalmazásával valósítják meg. A porózus katalizátorréteg egyik fő kihívása, hogy annyira hidrofób legyen, hogy meggátolva a túl nagy mennyiségű víz bejutását a rétegbe, visszaszorítsa a CO redukcióval hasonló termodinamikai

potenciálja miatt versengő vízbontás folyamatát.

SEQ ábra 1. ARABIC 1. ábra A Capstone ST-110 polimer szerkezeti képlete

Ezen, kellően hidrofób jelleg kialakításához bizonyos – főként polimer - anyagok alkalmazhatóak adalékként. Ezen polimerek esetleges egyéb szerepére viszont kevésbé ad információt a szakirodalom, így kutatásom során szisztematikusan változtatott funkciós csoporttal rendelkező polimerek alkalmazásával ennek felderítését tűztem ki célul. A kutatócsoportunk által sikeresen alkalmazott polimer adalékanyag, a **Capstone ST-110 (1.ábra)**, jellemzője, hogy változatos funkciós csoportokkal rendelkezik. Emiatt nem tisztázott, hogy melyek szükségesek a megfelelő szelektivitás és reakciósebesség eléréséhez. így egy egyszerűbb polimerből kiindulva, majd arra különböző funkciós csoportokat rögzítve vizsgáljuk hatásukat. Egy ilyen polimer lehet a



SEQ ábra 2. ARABIC 2. ábra PVDF szerkezeti képlete

polivinilidén fluorid (PVDF) (2.ábra), melyre az elmúlt bő egy évben ígéretes méréseket végeztem, amely arra enged következtetni, hogy az alappolimer is lényeges szelektivitás növekedéshez vezet. Eddigi méréseim során igen magas, 1200 mA/cm² áramsűrűsége is stabilan működő rendszert sikerült létrehoznom a katalizátorréteg PVDF tartalmának optimalizálásával. A termékanalízis során meghatároztuk, hogy a töltés közel 40%-a etilén, nagyjából 10%-a hidrogén, a fentmaradó 50%-a pedig folyadéktermékek képződésére fordult.

Hangolható szén-monoxid redukciós szelektivitás polianilin/réz nanokompozit elektrokatalizátorokon

Drágity Deján, Kormányos Attila, Janáky Csaba, Endrődi Balázs

Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi tanszék

A szén-dioxid elektrokémiai redukciója egy fontos módszere lehet a Párizsi Egyezmény által kijelölt szénmegkötési eljárásoknak, ahogy ezzel a módszerrel nem csak a kibocsátott szén-dioxid mennyisége csökkenthető (első sorban pl. ipari pontforrások esetén), de mindeközben hasznos vegyipari alapanyagok állíthatók elő. Az egyik ilyen termék a szén-monoxid, mely szelektíven (90-99% Faraday hatásfok, FE) előállítható szén-dioxidból iparilag releváns körülmények között. [1] A módszerrel sok más értékes vegyület is nyerhető, például etilén, etanol, acetát, n-propanol, stb. Jelen pillanatban azonban ezen termékek szelektíven, iparilag releváns áramsűrűségeken közvetlen szén-dioxidból nem állíthatók elő, javarészt amiatt, mert a különböző reakcióutak több köztermékben is osztoznak. [2] A szelektivitás feltételezések szerint megnövelhető a több szénatomos termékek irányába, ha a szén-dioxid helyett szén-monoxidot alakítunk tovább. Ennek lehetséges oka, hogy a CO közterméke az összes többszénatomos termék képződésének. Ezen felül a szén-monoxid nem oldódik az elektrolitban, ezzel a reaktánsvesztés minimalizálható, valamint ezúton nem változtatjuk meg az anód kémiai környezetét. [3]

A legtöbb jelenleg ismert, CO₂ és CO több szénatomos termékekké alakítására alkalmas katalizátor réz alapú. A katalizátort az elektrolizáló cellában egy gázdiffúziós elektród formájában használják. Ezeket gáz-diffúziós rétegre (GDL) felvitt vékony réteg réz nanorészecskékből alakítunk ki, melybe általában valamilyen hidrofób kötőanyagot (binder) építenek be.

Kutatásom során kis réztartalmú (0,03-25w%) polianilin/réz (PANI/Cu) nanokompozitokat állítottam elő. Céлом volt egy olyan szintézismódszer kidolgozása, mely egyszerű, reprodukálható és költséghatékony. A PANI/Cu nanokompozitok egyszerűen PANI-szuszpenzió és alkalmas mennyiségű réz-szulfát oldat kevertetésével készültek, amit feltételezhetően a polimer lánc nitrogén funkciói és réz-ionok közt kialakult kölcsönhatások stabilizáltak. A réz kémiai állapotát röntgen diffrakciós spektroszkópiával és infravörös spektroszkópiával is vizsgáltuk, jelenlétét (és eloszlását, ahol megfigyelhető volt) SEM és TEM technikákkal igazoltuk, valamint megfigyeltük, hogy bizonyos réz koncentrációk felett a réz egyre növekvő méretű polikristályos gócot alkot. E PANI mátrixban homogén elosztatott réz kis koncentrációk mellett is képes kifejteni katalitikus aktivitását, valamint a szintézis módja, réz koncentrációja és a választott elektrolit anyagi minőségétől függően akár metánra (~70% FE 100mA cm⁻²) akár többszénatomos termékekre (~80% FE, 100mA cm⁻², ebből ~20% FE etilén, 40% FE acetát, ~20% FE etanol) is szelektívvé tehető az eljárás, mindeközben a versengő hidrogén fejlődés akár 10 FE% alá is csökkenhet. Megállapítottam, hogy a réz mennyiségének, az elektrolit anyagának és koncentrációjának van döntő szerepe a kialakuló szelektivitásban. A katalízist folyamatos áramlásos mikrofluidikai és rés nélküli elektrolizáló cellában is tanulmányoztam, utóbbiban hosszútávú stabilitást is megfigyeltem.

[1] Sarah M. Jordaán, Chao Wang: Nat. Catal., **2021**, 915-916

[2] Ruud Kortlever et al.: J. Phys. Chem. Lett., **2015** 6(20), 4075-4076

[3] Attila Kormányos et al.: EES Catal., **2023**, 263-264

Antioxidáns kompozitok előállítása mangán-oxid és cérium-oxid nanozyme-ok kontrollált heteroaggregációjával

Viczián Dániel^a, Nizar B. Alsharif^a, Szilágyi István^a

^aSzegedi Tudományegyetem MTA-SZTE „Lendület” Biokolloidok Kutatócsoport, 6720 Szeged Rerrich Béla tér 1

Az antioxidáns enzimek hatékonyan és szelektíven katalizálják többek között reaktív oxigén származékok bomlását, ezáltal elengedhetetlenek számos ipari és biológiai rendszerben. Komoly hátrányokat jelentenek azonban kinyerésük és tárolásuk költségei, valamint aktivitásuk elvesztése a környezetük kis változásainak hatására. Alternatívát jelenthetnek a nanozyme-ok [1] – enzimutánzó nanorészecskék –, amelyek olcsón előállíthatók, aktivitásukat pedig szélsőséges körülmények között (például magas hőmérsékleten) is képesek megőrizni.

Munkánk során antioxidáns kompozitokat állítottunk elő két nanozyme (mangán-oxid mikropelyhek (MnO₂ MFs) és cérium-oxid nanorészecskék (CeO₂ NPs)) kontrollált heteroaggregációjával [2]. A részecskék felületét poli(diallil-dimetil-ammónium-klorid) (PDADMAC) polielektrolittal funkcionizáltuk, ezáltal megváltoztatva a felületi töltésük előjelét, illetve hangolva a részecskék között fellépő elektrosztatikus kölcsönhatásokat [3]. A funkcionizált MnO₂ MFs (PMn) és az ellentétes töltésű CeO₂ NPs heteroaggregációja a Ce-PMn kompozitot eredményezte. Továbbá, a funkcionizált CeNPs (PCe) részecskéket immobilizáltuk az ellentétes töltésű MnO₂ MFs felületén, ezzel előállítva a Mn-PCe kompozitot. A PDADMAC adszorpciója és a funkcionizált részecskék immobilizációja is a felületi töltés előjelváltozását, ezáltal magas, pozitív töltés kialakulását eredményezte. A részecskék között fellépő erőhatások, illetve a kompozitok stabilitása szoros összefüggésben állt a PDADMAC mennyiségével, valamint a komponensek arányával. Ez lehetővé tette az előállított kompozitok fizikai-kémiai tulajdonságainak igény szerinti hangolását.

Eredményeink alapján a kompozitok képzése nem befolyásolta jelentősen az egyes komponensek antioxidáns hatását. Széles spektrumú enzimutánzó anyagokat állítottunk elő, amelyek a szuperoxid dizmutáz, oxidáz és peroxidáz enzimek aktivitását is mutatták. Az olcsó, egyszerű előállítást, számottevő kolloidstabilitást és finomhangolható tulajdonságokat is figyelembe véve, ezen kompozitok ígéretes antioxidánsoknak mutatkoznak számos ipari felhasználási területen.

[1] J. Wu et al.: *Chem. Soc. Rev.*, **2019** (48), 1004-1076.

[2] N. B. Alsharif et al.: *J. Phys. Chem C*, **2023** (127), 17201-17212

[3] N. Madhavan et al.: *Langmuir*, **2023** (39), 2112-2134.

Köszönetnyilvánítás: A kutatást a Magyar Tudományos Akadémia Lendület programja (LP2022-16/2022), valamint a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Tehetség Programja (NTP-NFTÖ-22-A2-0301) támogatta. Köszönjük továbbá kollaborációs partnereink együttműködését.

ORVOSI KÉMIA SEKCIÓ

A jövő sebfedői? - Poliszukcinimid és só keverékéből háromdimenziós, nanoszálás struktúra előállítása

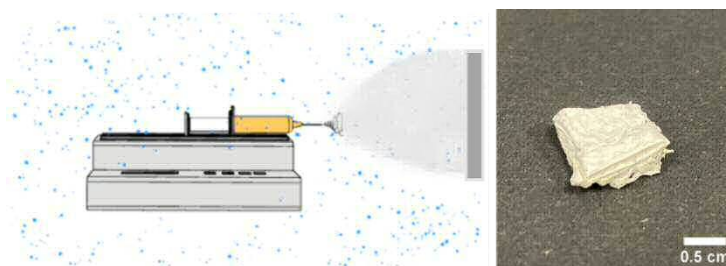
Nanys Mónika, Juhász Ákos György, Dr. Jedlovszky-Hajdú Angéla

Semmelweis Egyetem, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Nanokémiai Kutatócsoport, 1089 Budapest, Nagyvárad tér 4.

Elektrosztatikus szálhúzással előállított szálás szerkezetek nano- és mikroszálakból állnak, melyek az emberi szervezet kötőszöveti sejteket körülvevő extracelluláris mátrixához (ECM) hasonló hálózatot alkotnak. Ez a természet-utánozó tulajdonság, illetve egy páciens sejteinek a szálás struktúrára ültetése segíti elő a sebek, sérvek gyorsabb gyógyulását [1,2]. Azonban, ha a szálak közötti pórusok mérete nem megfelelően nagy, a sejtek nem tudnak a szálás rendszerbe jutni és a rájuk jellemző natív formát felvenni.

A pórusméretnövelés két lehetséges módja só alkalmazása, illetve a páratartalom változtatása. Munkám során korábbi kísérletek eredményeként a legalkalmasabbnak vélt CaCl_2 -ot használtam. Célom a megfelelő só koncentráció megtalálása volt, valamint a páratartalom és só hatásának vizsgálata a kialakult szálás szerkezetekre.

Kísérleteim során különböző poliszukcinimid- (17-25 m/m %) és sókoncentrációjú (3-7 m/m % CaCl_2) oldatokat készítettem dimetilformamidot használva. Az elektrosztatikus szálhúzás során ebből a viszkózus polimer oldatból elektromos tér hatására képződtek szilárd polimer szálak. Alacsonyabb (20 m/m%) poliszukcinimid koncentrációjú oldatok során megjelenő hibahelyek só oldathoz adásával, illetve magasabb (22,5 és 25 m/m %) poliszukcinimid koncentrációknál só nélkül is eltűntek, míg utóbbi esetben nagyobb szálátmérőt mértünk. CaCl_2 oldathoz adása a szálak felszínén barázdák megjelenését is indukálta. Só alkalmazása lehetővé tette egy adott páratartalom szint felett (48%) a háromdimenziós forma kialakítását is, mely változás só nélkül nem volt megfigyelhető. Statisztikai vizsgálat kimutatta, hogy a polimer- és só koncentráció, illetve a relatív páratartalom együttesen is hat a szálátmérőre. FTIR spektroszkópiai, XRD és TGA mérések során az oldatösszetevők közötti molekuláris kapcsolatokat ismertük meg, mely kulcsfontosságú lehet a makro- és mikroszkópikus tulajdonságok kialakításánál.



1. ábra: Az elektrosztatikus szálhúzás sematikus ábrája és egy a kísérletek során készített háromdimenziós háló

[1] D. Fehér, A. Ferencz, Gy. Szabó, K. Juhos, D. Csukás, C. Voniatis, L. Reininger, K. Molnár, A. Jedlovszky-Hajdú, Gy. Wéber: *IET Nanobiotechnology*, **2021** (15), 565-574.

[2] M. Kaya, Z. B. Ahi, E. Ergene, P. Y. Huri, K. Tuzlakoglu: *Wiley*, **2019** (14), 347-354.

Köszönöm a felkészítést Juhász Ákos Györgynek, Dr. Jedlovszky-Hajdú Angélának és a Nanokémiai kutatócsoportnak! A kutatás támogatója az OTKA Alapítvány (NKFIH FK 137749) és az ÚNKP – 21 – 3 – II – SE – 56 Új Nemzeti Kiválóság Program

Poliszukcinimid/szervetlen só keverékéből előállítható szálak struktúrák orvosi alkalmazhatósága

Pálos Veronika^a, Pázmány Rita^a, S. Nagy Krisztina^a, Juriga-Tóth Krisztina^a, Budavári Bálint^a, Domokos Judit^b, Szabó Dóra^b, Zsembery Ákos^c és Jedlovszky-Hajdú Angéla^a

^a Nanokémiai Kutatócsoport, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Semmelweis Egyetem, 1089 Budapest Nagyvárad tér 4.

^b Orvosi Mikrobiológiai Intézet, Semmelweis Egyetem

^c Orálbiológiai Tanszék, Semmelweis Egyetem

Kutatásunk során elektrosztatikus szálképzéssel olyan két komponensű, biodegradálható polimer hálót hoztunk létre, amely poliszukcinimid (PSI) mellett antibakteriális hatású sókat is tartalmaz. A gyakorlatban használt antibakteriális szerek a legtöbb esetben ezüst-ionokat tartalmaznak, azonban ezek használata nagy környezeti terhelést jelent, illetve néhány esetben nem kívánt immunreakciót is okozhat, ezért fontos más ilyen hatású rendszerek kifejlesztése. Munkám során antibakteriális és szövetregeneráló $\text{Zn}(\text{O}_2\text{CCH}_3)_2$ és különböző koncentrációban $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ sókat tartalmazó nanoszálak rendszereket hoztam létre elektrosztatikus szálképzéssel, amely struktúrák a jövőben alkalmasak lehetnek orvosi biológiai célú sebfejtő rendszerek kifejlesztésére.

A sebfejtőként alkalmazható hálók fizikokémiai, mechanikai és biológiai tulajdonságainak optimalizálása érdekében számos kísérletet végeztünk el. A PSI szintézise, majd a sók hozzáadása és a szálképzés elvégzése során kapott hálós rendszereket először pásztázó elektronmikroszkópos (SEM) felvételek segítségével vizsgáltuk. A különböző sók hatására a PSI polimer alapú rendszerek szálátmérője majdnem minden esetben szignifikánsan csökkent (<500 nm). Fourier transzformációs infravörös (FTIR) spektroszkópia segítségével vizsgáltuk, hogy a sók valóban megjelentek-e a hálókban, továbbá azt, hogy milyen kölcsönhatás alakult ki a só és a polimer között. Egy sebfejtő létrehozása során fontos a mechanikai tulajdonságok vizsgálata, hiszen a bőr felületén a sebfejtő számos hatásnak van kitéve. A kísérletek alapján a polimer háló mechanikai tulajdonságai jelentősen megváltoztak a sók hatására, mind a fajlagos szakítószilárdságát, mind a százalékos megnyúlásértékeit tekintve. Ezen felül kioldódási vizsgálatokat végeztünk, mivel a sók antibakteriális tulajdonságukat leginkább úgy tudják kifejteni, ha a hálóból képesek kioldódni. A kioldódás mértéke a két só esetében eltérő volt. Mindezek mellett antibakteriális-hatás vizsgálatot végeztünk négy különböző, felszíni sérüléseknél releváns baktérium törzs esetében. Az eredmények alapján a legtöbb esetben a hálóból készített korongok körül feltisztulási zónák jelentek meg. A hálók potenciális citotoxicitását is vizsgáltuk, hogy kiderítsük a só-tartalmú polimer hálók milyen hatással vannak a humán eredetű tumor, illetve az egészséges sejtekre. A hálók a $\text{Zn}(\text{O}_2\text{CCH}_3)_2$ só-tartalmú kivételével nem citotoxikusak sem a tumor, sem az egészséges sejtek tekintetében.

Köszönetnyilvánítás: A kutatást az NKFIH FK137749 és a TKP 2021-EGA-23 pályázati források segítségével kivitelezte.

Fertőtlenítő hatású PVA szövetek előállítása

Kiss Eszter^{a,c}, Fábíán István^{a,b}, Szabó Mária^{a,b,c}

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

^bHUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport,
Debreceni Egyetem, Debrecen, Egyetem tér 1., Magyarország, 4032

^cPremed Pharma Kft., Budaörs, Magyarország, 2040

Az elektroszálhúzással előállított nanoanyagokat számos orvosi, gyógyászati területen használják. Széles körben alkalmazzák a biomedicinában, szövet- és szűrési technológiában, levegő- és víztisztításban, szenzortechnológiában és kozmetikában is [1]. Gyógyszerhordozó tulajdonságuknak köszönhetően antibiotikumok, rákellenes szerek, antioxidánsok, fehérjék és DNS-molekulák célzott bejuttatására is alkalmasak az élő szervezetbe. A szálhúzott anyagok gyógyszerhordozóként történő alkalmazásukat a nagy felület/térfogat arányuk teszi lehetővé a hatóanyag gyors felszabadulását [2,3].

*Electrospinning*gel különböző kémiai összetételű polimer szálak állíthatók elő változatos formában. A biokompatibilis polimerek humán gyógyászati célú felhasználásának jelentős korlátja, hogy csak steril körülmények között alkalmazhatók. A hagyományos sterilizációs eljárások nem alkalmasak ezen anyagok fertőtlenítésére, mivel porózus szerkezetük belső felülete nem hozzáférhető, és ezek az eljárások megváltoztathatják a polimerek fizikai-kémiai tulajdonságait.

Kutatómunkánk során egy jól ismert fertőtlenítőszerrel, a nátrium-klorittal funkcionizált, polivinil-alkohol alapú szálpaplanokat állítottunk elő. A pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) készült felvételek azt mutatják, hogy egységes porózus szerkezetek alakulnak ki a folyamat során. Ezen anyagok klorition-tartalmát ionkromatográfiával határoztuk meg és vizsgáltuk a klorition hosszútávú stabilitását.

[1] Um, I. C., et al.: *Biomacromolecules*, **2004** 5(4): 1428-1436.

[2] Wang, X., et al. *Polymer* **2005** 46(13): 4853-4867.

[3] Liu, Y., et al. *Carbohydrate Polymers* **2011** 83(2): 1011-1015.

Az anyagi forrásért köszönetet mondok az NKFIH OTKA K-139140 számú pályázatnak. A C1775385 számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a KDP-2021 pályázati program finanszírozásában valósult meg. Köszönjük az anyagi támogatást a Premed Pharma Kft.-nek.



AZ NKFI ALAPBÓL
MEGVALÓSULÓ
PROJEKT



Fém tartalmú nanorészecskék antibakteriális és citotoxikus hatása, irodalmi összefoglalás

Sarolta Halmóczy, Angéla Jedlovszky-Hajdú

Nanokémiai Kutatócsoport, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, Semmelweis Egyetem

Bevezetés, célkitűzések: Napjainkban a multirezisztens-baktériumok elterjedése különösen nagy kihívást jelent a krónikus sebek gyógyulásánál. Ezek a sebek nem kezelhetőek hatékonyan a hagyományos antibiotikumokkal, ezért alternatív módszereket és komponenseket vizsgálnak ezek helyettesítésére. [1] [2] A fém tartalmú nanorészecskék (MeNP-k) ilyen tekintetben igen ígéretes anyagok lehetnek, mivel szignifikáns antibakteriális aktivitással rendelkeznek azzal az előnnyel, hogy jelenleg a baktériumok még nem alakítottak ki ellenük rezisztanciát. [3] Ugyanakkor a MeNP-k alkalmazása kihívást jelenthet, mivel a mikroorganizmusokkal szembeni toxikus hatása nem szelektív, tehát citotoxikus tulajdonságúak. [2] Számos kutatási cikk jelent meg, amely a különböző MeNP-k sebgyógyító alkalmazhatóságát vizsgálja. Azonban hiánypótló lenne egy olyan áttekintő cikk, amely összehasonlítja a legígéretesebb MeNP-k antimikrobiális és citotoxikus tulajdonságait. Ez a cikk hozzájárulna egy rendkívül komplex téma átláthatóságához, ezzel irányt adva a jövőbeli kutatásoknak is.

Következtetések: A munka során ezüst-, arany-, réz-, vas- és cinktartalmú nanorészecskék sebgyógyító alkalmazhatóságával kapcsolatban több mint 50 tudományos cikket tanulmányoztunk. Az összehasonlítás során elsősorban az antimikrobiális aktivitásra, illetve a citotoxikus hatásra helyeztük a hangsúlyt. Sok esetben a MeNP-keket nem önmagukban, hanem bevonatokkal, gélekkel, vagy más hatóanyagokkal, például hagyományos antibiotikumokkal együtt alkalmazták. Az antibiotikus hatás meghatározásához számos Gram-pozitív és Gram-negatív baktériumtípust kezeltek fém nanorészecskékkal, a citotoxicitást pedig rákos és egészséges sejtvonalakon is vizsgálták. Számos citotoxicitás-csökkentő, illetve antimikrobiális hatást erősítő egyedi módszert fejlesztettek ki, azonban általánosságban elmondható, hogy a MeNP-k hatása dózis-, forma- és méretfüggő, de az expozíciós idő és a felhasznált sejtvonal, illetve baktérium törzs sem elhanyagolható tényező a vizsgálatok során.

A kutatást az NKFIH FK 137749; TKP2021-EGA-23 támogatta.

Források

- [1] C. Liao, Y. Li, S.C. Tjong, Bactericidal and cytotoxic properties of silver nanoparticles, Int. J. Mol. Sci. 20 (2019). <https://doi.org/10.3390/ijms20020449>.
- [2] N. Naderi, D. Karponis, A. Mosahebi, A.M. Seifalian, Nanoparticles in wound healing; from hope to promise, from promise to routine, Front. Biosci. - Landmark. 23 (2018) 1038–1059. <https://doi.org/10.2741/4632>.
- [3] L. Wang, C. Hu, L. Shao, The antimicrobial activity of nanoparticles: Present situation and prospects for the future, Int. J. Nanomedicine. 12 (2017) 1227–1249. <https://doi.org/10.2147/IJN.S121956>.

SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ

Fotokatalitikus rendszerek fejlesztése szén-szén kapcsolások kivitelezésére

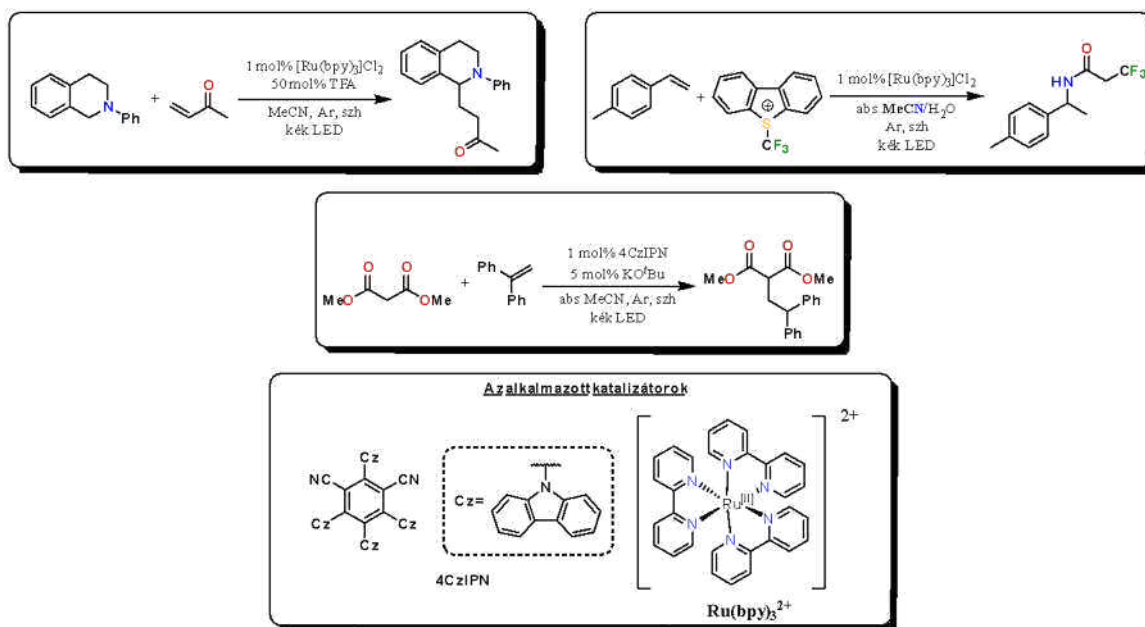
Gémes Gergő^a, Richter Dóra^a, Kisszékelyi Péter^b, Kupai József^a

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

^bComenius University Bratislava, Department of Organic Chemistry, 842 15 Bratislava, Ilkovičova 6.

Az elmúlt évszázad során felfedezték, hogy a fényenergia felhasználható kémiai reakciók kivitelezésére. A fotokatalízis addig ismeretlen kötések, illetve szerkezetek felfedezését tette lehetővé, manapság pedig reneszánszát éli, és segítségével új szintetikus utak nyithatóak meg.

Munkám során célom volt fotokatalitikus rendszerek fejlesztése, valamint azok alkalmazása C–C kapcsolási reakciókban. Először előkísérleteket végeztem, melynek során sikerült igazolnunk a várt termék keletkezését, ezzel bizonyítva a rendszer működőképességét. Az előkísérletek során legjobbnak bizonyuló protokollt alkalmaztam trifluormetilezési reakciókban is, ám a reakcióelegy túlmelegedése meggátolta a termék keletkezését. A jobb hűtést szem előtt tartva terveztem egy új készülék elrendezést, amelyben néhány kezdeti nehézség után sikerült megvalósítani a 4-metilsztirol aminotrifluormetilezését. (1. ábra) Mivel csoportunk organokatalízissel foglalkozik, így a fémkomplexek mellett egy nehézfémmentes fotokatalizátort, a 4CzIPN-t vizsgáltam a továbbiakban. Az első két reaktor fényforrását LED-szalagok képezték. A nagyobb fényintenzitás érdekében pedig beszereztünk egy nagy teljesítményű Kessil LED-lámpát is, hiszen a fotokatalitikus reakciókban a fényintenzitás fontos paraméter. Ezt egy ideiglenes, házi készítésű reaktorban teszteltem. A két reaktort összehasonlítottam egy 4CzIPN által katalizált fotokémiai szén-szén kapcsolási reakcióban dimetil-malonát és 1,1-difeniletilén között. (1. ábra) A nagyobb intenzitás meghozta a várt eredményt: a LED-szalagos reaktorban 40% termelést, míg a Kessil lámpával 69% termelést sikerült elérnem.



1. ábra: A kutatómunkám során használt fotokémiai rendszerek

A szerzők köszönik az OTKA (FK138037), Nemzeti Labor Program (PharmaLab, RRF-2.3.1-21-2022-00015) és a Richter Talentum Alapítvány anyagi támogatását.

Aza-BODIPY típusú fényérzékenyítő anyagok szintézise

Hlogyik Tamás, Dr. Mernyák Erzsébet

Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Farmakognóziai Tanszék, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.
Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, 6720 Szeged, Dóm tér 8.
hlogyik@chem.u-szeged.hu

Az utóbbi években a BODIPY alapvázis vegyületcsaládba tartozó (4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacén) vegyületek kiváló kémiai, fizikai és fotokémiai tulajdonságaik miatt felkeltették a figyelmet. Ezek a fluorofórok magas abszorpciós együtthatóval és jó kvantumhatásfokkal rendelkeznek, így a fotodinámiás terápiában fényérzékenyítő anyagokként széleskörűen alkalmazhatók, de az alacsony gerjesztési hullámhossz (<600 nm) korlátozza felhasználhatóságukat [1]. A *mezo*-helyzetben nitrogén atomot tartalmazó *aza*-BODIPY származékaik fényemissziója a vörös tartományba tolódik, így kevésbé károsítják a sejtkomponenseket, és szuperfelbontású mikroszkópiai vizsgálatokban is hatékonyabban alkalmazhatók [1, 2]. Az utóbbi időben egyre inkább kezd elterjedni az *aza*-BODIPY alapvázis vegyületek fényérzékenyítő anyagként való felhasználása is a fotodinámiás terápiában [3].

Kutatásaink során célunk volt olyan, különböző funkciós csoportokat tartalmazó *aza*-BODIPY alapvázissal rendelkező anyagok előállítása, melyek fényemissziója a vörös tartomány felé tolódik. Együttműködésben terveztük az újonnan előállított származékok fotodinámiás terápiában való alkalmazhatóságának vizsgálatát. További céljaink között szerepelt a leghatékonyabb és leggyorsabb szintézisútvonat megtalálása a zöld kémia elveinek megfelelően.

Sikerült olyan stratégiát kidolgoznunk az előállításukra, amely elkerüli a halogénezett reagensok használatát, és az irodalmi forrásokkal ellentétben, sokkal rövidebb reakcióidővel és kisebb oldószermennyiséggel dolgoztunk.

Munkánk során kulcs reakciólépésként a réz(I)-katalizált azid-alkin cikloaddíciós reakciót alkalmaztuk. Az előállított fényérzékenyítő anyagok (a tetrafenil-*aza*-BODIPY, annak propargil, valamint két triazolil származéka) fotodinámiás aktivitását vizsgáltuk az A431 emberi bőrlaphám karcinóma sejtvonalon. A négy vizsgált vegyület elhanyagolható sötét toxicitást mutatott, míg kettőnél jelentős fototoxicitást állapítottunk meg. Ezek közül kiemelendő a két hidrofíl oldalláncot tartalmazó trietilénglikol-származék, amely eddig nem ismert vegyületként az irodalomban is egyedülálló, alacsony nanomólos IC₅₀ értékkel rendelkezik. Jövőbeni felhasználásukat tekintve, ezen származékok számos területen ígéretesek lehetnek, mert nem tartalmaznak halogén- vagy nehézfématomot, előállításuk megfelel a zöld kémia alapelveinek, és alacsony sötét toxicitással rendelkeznek.

[1] T. Kowada, H. Maeda, K. Kikuchi.: *Chem. Soc. Rev.* **44**, **2015**, 4953–4972.

[2] J. Killoran, L. Allen, J.F. Gallagher, W. M. Gallagher, D.F. O'Shea.: *Chem. Commun.* **2002** (17), 1862–1863.

[3] S. G. Awuah, Y. You.: *RSC. Adv.* **2012** (2), 11169–11183.

Köszönjük az NKFIH OTKA SNN 139323 támogatását.

Biológiailag aktív kannabigerol származékok előállítása Mannich reakcióval

Tóth Gergely, Lóricz Eszter Boglárka, Dr. Bakai-Bereczki Ilona

Debreceni Egyetem, Gyógyszerészi Kémia Tanszék 4032, Debrecen, Nagyerdei krt. 98

Bevezetés

A CBG, vagy kannabigerol egyike a *Cannabis sativában* megtalálható számos kannabiodnak. A szervezetben számos receptorhoz kötődik, amitől jelentős terápiás potenciált mutat fájdalomcsillapítóként, gyulladásgátlóként [1], metabolikus, GI és kardiovaszkuláris megbetegedések ellen alkalmazva, vagy akár tumor terápiában.

Célkitűzés

Munkánk céljai között szerepelt a CBG fenolos hidroxil-csoportjai melletti szénatomokra különböző aminok kapcsolása Mannich típusú reakcióval. Az előállított származékok antibakteriális, antivirális, rákellenes, és antioxidáns hatásait vizsgálták, illetve bőrsejtek esetében meghatározták az életképességre és faggyúlipid termelésre gyakorolt hatásukat.

Módszertan

A származékok előállításához szerves kémiai preparatív módszereket alkalmaztunk. A reakciók végbemenetelét és a termékek tisztaságát vékonyréteg kromatográfiával ellenőriztük, a tisztítást oszlopkromatográfiával végeztük. A termékek azonosításához MALDI-TOF tömegspektrometriát és NMR spektroszkópiát használtunk.

Eredmények

Az aminocsoportokkal módosított CBG származékok biológiai vizsgálata alapján az anyagaink antibakteriális hatása gyengébb volt az anyavegyületnél, azonban néhány származék SARS-CoV-2 és rák ellenes hatása kitűnőnek bizonyult.

[1.] Robaina Cabrera, C.L., et al., Pulm Pharmacol Ther, 2021. **69**: p. 102047.

Köszönetnyilvánítás

A munkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) „OTKA” FK 142315 pályázata támogatta.

A kutatás az EU támogatásával, és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával a GINOP-2.3.4-15-2020-00008 projekt keretében valósult meg.

A publikáció/prezentáció/poszter elkészítését az EFOP-3.6.1-16-2016-00022 számú projekt támogatta.

A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Antitumor hatású protoflavon-indol hibrid vegyületek előállítása és vizsgálata

Girst Gábor^a, Lopes Elizabeth A.^b, Barcherini Valentina^b, Gonçalves Lídia M.^b, Santos Maria M. M.^b, Wang Hui-Chun^c, Hunyadi Attila^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Farmakognóziai Intézet, 6720, Szeged. Eötvös u. 6.

^b Research Institute for Medicines, Faculty of Pharmacy, Universidade de Lisboa, Av. Prof. Gama Pinto, 1649-003 Lisboa, Portugal.

^c Graduate Institute of Natural Products, Kaohsiung Medical University, ShihChuan 1st Rd. 100, Kaohsiung 807, Taiwan

A mellrák napjaink egyik legelterjedtebb rákos megbetegedése, amely évente több mint kétfélmillió nőt érint. A tripla-negatív emlőkarcinóma a legnehezebben kezelhető altípus, mivel a jelenlegi kezelési lehetőségek korlátozottak és kemoterápiás szereket igényelnek. Éppen ezért elengedhetetlen új kezelési módszerek keresése.

A protoflavonok ritka, nem aromás B gyűrűvel rendelkező természetes flavonoidok, amelyek jellemzően páfrányfélékben fordulnak elő. Ezek a protoflavonok apoptózist indukálnak, és képesek gátolni a checkpoint kináz 1 (Chk-1) ATR által közvetített aktiválódását, amely a DNS-károsodásra adott válaszmechanizmus egyik kulcsfontosságú lépése [1].

A legtöbb rákos sejtből a p53 fehérje inaktivált vagy mutálódott, így nem képes tumorsuppresszorként működni. Több indol típusú vegyületről is kimutatták, hogy képesek ezt a folyamatot ellensúlyozni. Egyes triptofánból származó oxazoloizoidinonok képesek a mutáns p53 funkciójának helyreállítására, míg a spiropirazolin-oxindolok apoptózist indukálnak és felszabályozzák a p53 állandósult szintjét [2, 3]. Az ATR-gátló vegyületek viszont szelektíven toxikusak a mutáns p53-at expresszáló rákos sejtekre [4].

Jelen tanulmányban új hibrid vegyületek előállítását tűztük ki célul a fenti, eltérő tumorelles mechanizmussal rendelkező vegyületek kombinálásával, a fokozott tumorelles aktivitás elérése érdekében. Módosított oldalláncokat és réz(I)-katalizált alkin-azid cikloaddikációs reakciókat (click-reakció) felhasználva 17 új hibrid vegyületet szintetizáltunk. Az MTT teszten a legjobb vegyületek néhány mikromólos antitumor IC₅₀ értéket mutattak az MCF-7 és MDA-MB-231 sejtvonalakon. Számos hibrid vegyület mutatott jelentős szelektivitást a tripla-negatív MDA-MB-231 sejtvonallal szemben. A legaktívabb vegyületek a doxorubicin-indukálta DNS-károsodásra adott választ a Chk-1 ATR-függő aktiválódásának gátlásán keresztül modulálták, miközben a Chk-2 aktiválódását növelték. Eredményeink arra utalnak, hogy a hibridek új vezérmolekulákként szolgálhatnak a tripla negatív emlőrák ellen [5].

[1] A. D. Latif, et al.: *Antioxidants*, **2020** (9), 519.

[2] A. S. Gomes, et al.: *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects*, **2020** (1864), 129440.

[3] R. C. Nunes, et al.: *European Journal of Medicinal Chemistry*, **2017** (139), 168-179.

[4] P. M. Reaper, et al.: *Nat. Chem. Biol.*, **2011** (7), 428-430.

[5] G. Girst, et al.: *RSC Medicinal Chemistry*, **2023** (14), 1778-1786.

Köszönetnyilvánítás: Készült a Kétoldalú tudományos és technológiai (TÉT) együttműködési pályázat keretében (NKFIH, 2018-2.1.15-TÉT-PT-2018-00016).

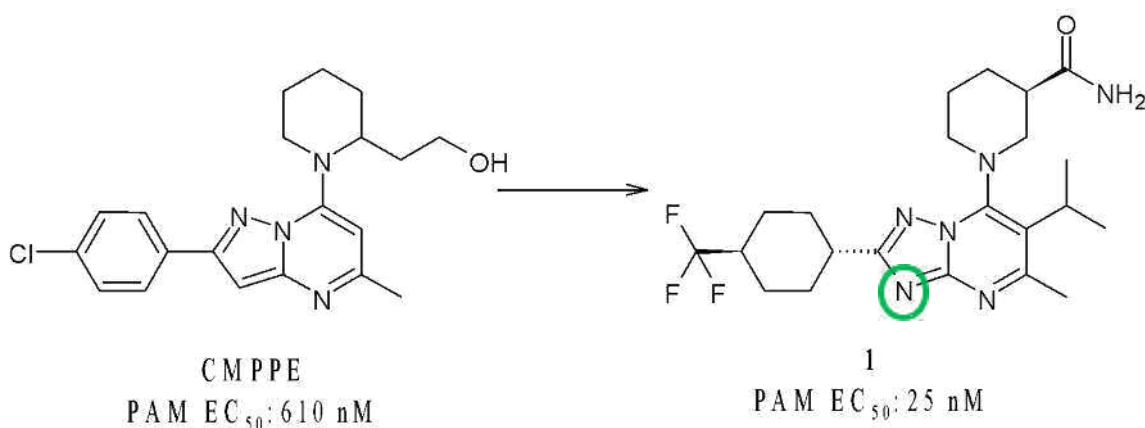
Új,
[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidin vázas GABA_B pozitív allosztérikus
modulátorok szintézise

Petró József Levente^a, Borza István^a, Román Viktor^a, Bobok Amrita Ágnes^a, Éles János^a

^a*Richter Gedeon Nyrt. 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.*

Az irodalomban számos GABA_B receptoron ható pozitív allosztérikus modulátorra (PAM) találhatunk példát [1-3]. Ezek nagy előnye az agonistákkal szemben (amilyen pl. a *baklofén* is) hogy a receptort a szinaptikus aktivitástól függően aktiválják, ezáltal kevesebb mellékhatás tapasztalható. Előnyei ellenére még sincs a klinikai gyakorlatban FDA (United States Food and Drug Administration) által engedélyezett PAM.

Kutatásaink során olyan új vegyületeket szintetizáltunk, és vizsgáltunk *in vitro* melyek potenciálisan szóba jöhetnek mint GABA_B pozitív allosztérikus modulátorok. Az irodalmi referencia CMPPE-ből kiindulva, a *scaffold hopping* elvet követve, sikeresen azonosítottunk egy új, aktív központi vázat. Többlépcsős gyógyszerkémiai optimalizációval, a szubsztituensek fokozatos helyes megválasztásával jutottunk az **1** vegyülethez, mely 25 nM-os aktivitásával a referenciavegyülethez képest több mint egy nagyságrenddel pontosebb.



[1] S. Urwyler et al.: *J. Pharmacol. Exp. Ther.*, **2003** (307), 322-330.

[2] S. Guery et al.: *Bioorganic Med. Chem. Lett.*, **2007** (17), 6206-6211.

[3] E. Perdoni et al.: *Neuropharmacology*, **2011** (61), 957-966.

Mikrotálca rendszeren alapuló, nagy áteresztőképességű enantiomerszeparációs eljárás kidolgozása

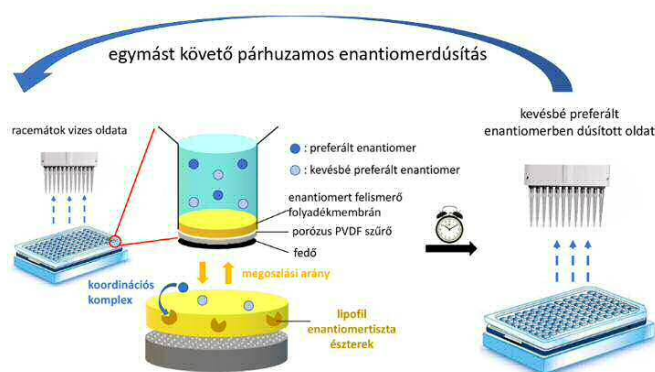
Jávor Bálint^a, Vezse Panna^a, Golcs Ádám^{a,b}, Huszthy Péter^a, Tóth Tünde^{a,c}

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

^bSemmelweis Egyetem Gyógyszerészi Kémiai Intézet, Budapest, Högyes Endre u., 1092

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

Kutatómunkánk során olyan enantiomerelválasztási módszert terveztünk, amely hozzájárul az automatizált, kisléptékű, szintetikus módszerekkel nyert királis molekulák nagy áteresztőképességű enantiomerszeparációjához. Könnyen hozzáférhető rezolválószeres lipofil észtereit állítottuk elő és folyadékmembránként használtuk őket egy mikrotálca indifferens PVDF polimerfelületén. A királis modellvegyületeket racém keverékük vizes oldataiból kiindulva inkubáltuk ezáltal dúsítva az adott szelektormolekulából készített membrán által kevésbé preferált enantiomerjüket. Az enantiomerelválasztás azáltal következett be, hogy a folyadékmembránok belsejében a lipofil enantiomertiszta gazdamolekulák eltérő stabilitású diasztereomer koordinációs komplexeket képeztek a királis molekulák enantiomerjeivel. Ez az enantiomerfelismerés az előnyben részesített izomer nagyobb megoszlási arányát eredményezte a membránfázisban, így az eljárás lehetővé teszi a membránon kívül a kevésbé preferált konfigurációjú enantiomer felhalmozódását. Jelen előadás egy új, mikrotálccával integrált sztereoszelektív membrándúsítási technikáról számol be, amely lehetővé teszi a rokon szerkezetű vegyületek preparatív lépték alatti párhuzamos, automatizálható enantiomerdúsítását.



Köszönetnyilvánítás:

Külön köszönet Pikler Gergőnek a munkát inspiráló beszélgetésekért. A szerzők köszönetüket fejezik ki Ster Dánielnek és Molnárné Bernáth Ritának a hasznos technikai támogatásért. Köszönet László Szabolcsnak az új vegyületek jellemzésében nyújtott segítségéért és Mihalec Melindának a spektroszkópiai adatok kiértékelésében nyújtott hozzájárulásáért.

**FENNTARTHATÓ KÉMIA/SUSTAINABLE CHEMISTRY
SZEKCIÓ**

Perszulfát-ionok hatása a ZnO heterogén fotokatalitikus aktivitására trimetoprim bontása során

Veres Bence, Vas Benjámin, Alapi Tünde

Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Dóm tér 7-8.

Napjainkban a vízkezelés egyik megoldást sürgető problémája a nem biodegradálható, és biológiai hatással rendelkező szerves vegyületek eltávolítása, melyek a konvencionális biológiai kezelés után is jelen vannak a vízben. Erre jelenthetnek megoldást a gyökgeneráláson alapuló nagyhatékonyságú oxidációs eljárások, mint utókezelési módszerek. Ezek közé tartozik a heterogén fotokatalízis, amely során a félvezető fotokatalizátort megfelelő hullámhosszúságú fénnel megvilágítva abban töltésszeperáció jön létre. A fotogenerált töltések élettartamát, ezen keresztül pedig a módszer hatékonyságát jelentősen befolyásolják a rendszerben lévő komponensek. Perszulfát eljárással kombinálva a heterogén fotokatalízis hatékonysága növelhető. A peroxodiszulfát-ion ($S_2O_4^{2-}$, PDS) és peroxomonoszulfát-ion (HSO_5^- , PMS) egyrészt hatékony elektron befogóként, másrészt a hidroxilgyökhöz ($\cdot OH$) hasonló reaktivitással és oxidációs potenciállal rendelkező szulfátgyökion ($SO_4^{\cdot -}$) forrásként is növelheti az eljárás hatékonyságát. [1,2]

Munkánk során a trimetoprim antibiotikum hatóanyagot használtuk modellvegyületként ZnO/PMS és ZnO/PDS eljárások vizsgálatánál, 365 és 398 nm-en sugárzó LED-eket alkalmazva fényforrásként. Mindkét perszulfátió hozzáadása jelentősen növelte a ZnO, mint fotokatalizátor hatékonyságát. A trimetoprim PMS és PDS jelenlétében oldott O_2 nélkül is átalakult, ami a perszulfát sók hatékony elektronbefogó szerepét igazolta. Ugyanakkor gyökfogók segítségével bizonyítottuk, hogy a $SO_4^{\cdot -}$ mellett a $\cdot OH$ képződés sebessége is nő, hozzájárulása az átalakuláshoz szignifikáns marad. Emellett a ZnO katalitikus aktivitása három cikluson keresztül nem változott a perszulfát sók jelenlétében, azaz a katalizátor nem szenvedett szerkezeti károsodást.

A mátrixhatás vizsgálatára biológiailag kezelt kommunális szennyvizet használtunk, mely jelentős mennyiségű Cl^- és HCO_3^- iont tartalmaz. A szerves ionok jelentősen befolyásolják a ZnO felületén lejátszódó folyamatokat és gyökfogóként is csökkenthetik az átalakulás hatékonyságát. Szerepüket és hatásukat egyrészt a trimetoprim, másrészt a PDS átalakulási sebességén keresztül vizsgáltuk. Eredményeink alapján a szerves ionok, az oldott O_2 és a szerves vegyületek együttes jelenléte és egymással való versengése az adszorpciós helyekért, a fotogenerált töltésekért, valamint a képződő gyökökért összetett módon befolyásolja a kialakuló gyökkészletet és ezen keresztül a hatékonyságot.

[1] J. Lee, U. von Gunten, J. Kim: Environmental Science and Technology, **2020** (54), 3064-3081

[2] M. Náfrádi, T. Alapi, B. Veres, L. Farkas, G. Bencsik, Cs. Janáky: Materials, **2023** (16), 5920

A szerzők köszönik az Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) FK132742 számú OTKA pályázat támogatását. Veres Bence köszöni a Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-23-3-SZTE-534 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Program támogatását.

A szén-dioxid elektrokémiai átalakítását befolyásoló paraméterek rés nélküli elektrolizáló cellában

Samu Angelika Anita^{a,b}, Dr. Endrődi Balázs^a, Dr. Janáky Csaba^{a,b}

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

^beChemicles Zrt., 6726 Szeged, Alsó kikötő sor 11.

Aktuális környezetvédelmi feladata korunk társadalmának a levegőben felhalmozódott CO₂ koncentrációjának csökkentése. A légkörben megemelkedett CO₂ mennyiség hozzájárul olyan globális környezeti változásokhoz, mint a klímaváltozás. A CO₂ elektrokémiai redukciója egy ígéretes és biztonságos módszer a pontforrások (pl. cementgyár) kibocsátásának csökkentésére. Az elektrokémiai módszerek működtetése megvalósítható rendelkezésünkre álló, megújuló energiaforrások felhasználásával (pl. Nap, szél). A segítségével egy környezetkímélő és fenntartható technológia alakítható ki. [1]

A Szegedi Tudományegyetemen működő kutatócsoportunkban olyan elektrolizáló cellák fejlesztésével foglalkozunk, amelyek segítségével a CO₂ gázfázisú elektrokémiai redukciója valósítható meg. A kísérleteinknél egy kételektrodos, összepréselt cellát alkalmazunk (rés nélküli), ahol nincs az elektród-membrán-elektrod rétegek között folyadékréteg. Ezekben kereskedelmi forgalomban elérhető katalizátorokat, gázdiffúziós rétegeket, pórusos transzport rétegeket és anioncserélő membránokat alkalmazunk. Célunk az elektrolizáló cellán belül alkalmazott komponensek és a kísérleti körülmények (cellahőmérséklet, CO₂ gáz áramlási sebessége, gáznedvesítő hőmérséklete, elektrolizáló cellán átfolyó áramsűrűség) optimalizálása a hosszútávú (>1000 óra) szelektív és stabil működés fenntartására. A megfelelő hosszútávú működésnek számos kritériumnak meg kell felelnie (nagy energiahatékonyság, alacsony cellafeszültség, nagy CO képződési sebesség, stabilitás) – ezeket együttesen vizsgáljuk a kísérletek során.

Az elektrolizáló cella komponenseinek feltérképezése érdekében vizsgáltuk a különböző komponensek hozzájárulását a cellafeszültség és a termékeloszlás változására. A kísérleti paraméterek egymásra gyakorolt hatását figyeltük meg. Az elektrolizáló cellák elektrokémiai viselkedésének felderítését elektrokémiai módszerek segítségével (lineáris voltammetria, kronoamperometria, impedancia spektroszkópia) végezzük. A hosszútávú, állandó feszültségen vagy áramerősségen történő elektrolízisek során keletkező termékeket (CO, H₂) egy gázanalizátor segítségével analizáljuk.

[1] A. A. Samu, A. Kormányos, E. Kecsenovity, N. Szilágyi, B. Endrődi, C. Janáky, ACS Energy Lett. 2022 (7), 1859–1861.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium KDP-2021 kódszámú Kooperatív Doktori Program Doktori Hallgatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphól finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Toxikus vegyületek képződése és bomlása vízkezelési eljárásokban: a citromsav klórozása

Angyal Dávid^{a,b}, Papp Laura^a, Szabó Mária^{a,b}, Fábíán István^{a,b}

^aDebreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen

^bHUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen

A vízkezelési eljárások során kémiai és biológiai fertőtlenítést is alkalmaznak. A kémiai fertőtlenítések során erélyes oxidálószeret használnak, mint például klórt, hipoklórossavat, klór-dioxidot, ózont vagy ezek kombinációját. Az ammónia vagy más aminokat tartalmazó vegyületek jelenlétében, oxidatív közegben mono-, di- és triklóraminok jelennek meg, amik másodlagos fertőtlenítőszer. Alapvető probléma azonban, hogy szerves komponensek jelenlétében trihalometánok, valamint halogén-ecetsavak képződhetnek. Nitrogén tartalmú vegyületek oxidációja pedig toxikus nitrozovegyületek képződését eredményezi.[1]

Kutatómunkánk során a citromsav-hipoklórossav modell reakciót tanulmányoztuk részletesen, mivel irodalmi eredmények alapján ebben a folyamatban többféle haloecetsav is képződhet.[2] Kidolgoztunk egy olyan összetett analitikai módszert, ami lehetővé teszi a reaktánsok és a termékek koncentrációjának meghatározását minden időpillanatban. A jelentős toxicitású haloecetsavak, mint termékek pontos mennyiségét ionkromatográfiás módszerrel, míg a hipoklórossavat spektrofotometriásan tudtuk detektálni. A módszer optimalizálása során meghatároztuk a kimutatási és meghatározási határértékeket a monoklór-, diklór-, illetve triklórecetsav, valamint a citromsav esetében. A reakcióelegy NMR vizsgálata alapján megállapítható, hogy kloroform is jelen van a rendszerben, ahogyan azt az irodalmi előzmények is előrejelezték. A reaktánsok koncentrációjának szisztematikus változtatása során meghatároztuk a termékek arányának változását az idő függvényében.

További célunk, hogy a tanulmányozott folyamat részletes kinetikai modelljét és végül a reakció részletekbe menő mechanizmusát is meg tudjuk adni.

[1] Xiaochao Duan, Xiaobin Liao, Jianfei Chen, Shuguang Xie, Huan Qi, Fei Li, Baoling Yuan, *Science of the Total Environment*, 2020, 744, 140833.

[2] Yuto Tada, José Andrés Cordero, Shinya Echigo, Sadahiko Itoh; *Chemosphere*, **2021**, 263, 127862.

A kutatáshoz támogatást nyújtott a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (OTKA K-139140).

The effect of single crystal TiO₂/perovskite band alignment on the kinetics of electron extraction

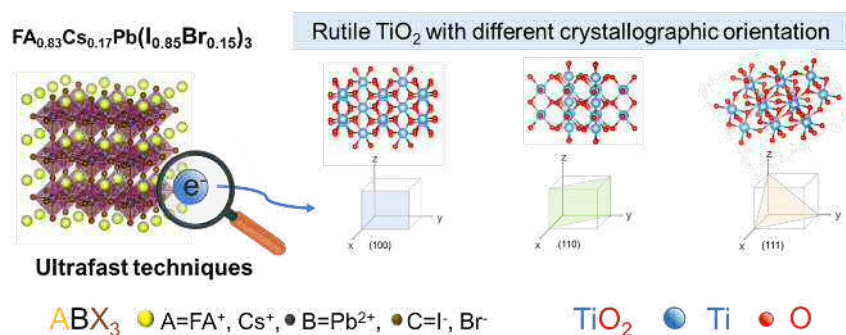
Xiangtian Chen^a, Ramsha Khan^b, Nikolai Tkachenko^b, Csaba Janáky^{a,c}, Gergely Ferenc Samu^{a,c,*}

^aDepartment of Physical Chemistry and Materials Science, Interdisciplinary Excellence Centre, University of Szeged, Aradi Square 1, Szeged, H-6720, Hungary

^bPhotonic Compounds and Nanomaterials, Chemistry and Advanced Material Group, Tampere University, Finland

^cELI ALPS, ELI-HU Non-Profit Ltd., Wolfgang Sandner street 3., Szeged, H-6728, Hungary

Lead halide perovskites are promising light absorbers in the field of light conversion devices (e.g., solar cells [1], photodetectors [2], light-emitting diodes [3]). Among these devices, its most prominent application is in solar cells. The overall efficiency of a perovskite based solar cell can be largely affected by the charge extraction kinetic at the charge transfer layer (CTL) and perovskite interface. In this study, the electron extraction process between perovskite and TiO₂ single crystals of (100), (110) and (111) facets are probed by transient absorption spectroscopy (TAS) and time resolved photoluminescence (TRPL). By combining these two techniques, we are able to track the charge dynamic after light excitation from sub picoseconds to several hundreds of nanoseconds. TiO₂ (100), which has the largest conduction band and fermi level difference with perovskite among the three facets, shows a fastest hot electron extraction kinetic. Although the accumulated electrons in TiO₂ (100) hinder band edge electron extraction in the following several nanoseconds. The process is accelerated again after those accumulated electrons go through back electron recombination. Furthermore, the study also shows the importance of varying excitation fluence while carrying out charge transfer study.



[1] G. Li et al. *Science*, **2023** (1979) 379, 399–403.

[2] C. Liu et al. *Advanced Science*, **2019**, 6.

[3] H. Cho et al. *Science*, **2015** (1979) 350, 1222–1225.

Acknowledgements:

This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie-Sklodowska-Curie grant agreement No. 861151 Solar2Chem.

Photoelectrochemical CO₂ Reduction on Au-decorated Sb₂Se₃ Photocathodes

John Mark Christian M. Dela Cruz, ^a Ádám Balog, ^a Gábor Bencsik, ^a Gergely F. Samu

^{a,b}

and Csaba Janáky * ^{a,b}

^a *Department of Physical Chemistry and Materials Science, Interdisciplinary Excellence Centre, University of Szeged, Aradi Square 1, Szeged, H-6720, Hungary*

^b *ELI-ALPS, ELI-HU Non-Profit Ltd., Wolfgang Sandner street 3., Szeged, H-6728, Hungary*

Direct photoelectrochemical (PEC) CO₂ reduction is one of the promising routes to produce alternative fuels. Sb₂Se₃ has gained attention as a photo-absorber in PEC hydrogen evolution reaction studies because of its favorable band positions while having a bandgap of 1.1 – 1.3 eV, similar to that of Si [1].

Herein, we studied photoelectrodes with architecture FTO/Au/Sb₂Se₃/TiO₂/Au for CO₂ reduction reactions (CO₂RR). The fabrication followed a simple spin-coating technique whereby nanorod-like structures were obtained for the Sb₂Se₃, as shown in the SEM images [2]. A 60 nm layer of TiO₂ was deposited via ALD which acted as both an electron transfer layer and a protective coating. Nanoparticles of Au were deposited as co-catalysts on top of the assembly through photo-assisted electrodeposition methods, using three different deposition potentials and three different loading of catalysts. SEM images showed that the morphology, density, and growth of the Au nanoparticles were dependent on the applied potential during deposition.

The photoelectrode performance for CO₂RR was investigated and benchmarked against a Au foil. A photocurrent density of 7.5 mA cm⁻² at -0.5 V vs. RHE was recorded, which is a 3x increase compared to the Au foil in similar conditions under dark (2 mA cm⁻²). An average faradaic efficiency of 25 ± 6% for CO and 63 ± 12% for H₂ was recorded for the set of photoelectrodes, independent of the deposition conditions. This set of results provide an encouraging reason for Sb₂Se₃-based photoelectrodes in solar-to-chemical applications, particularly in CO₂ conversion applications.

[1] R. Vadapoo, S. Krishnan, H. Yilmaz and C. Marin, *Phys. Status Solidi B*, 2011 (**248**), 700–705.

[2] J. Kim, W. Yang, Y. Oh, H. Lee, S. Lee, H. Shin, J. Kim and J. Moon, *J. Mater. Chem. A*, 2017 (**5**), 2180–2187.

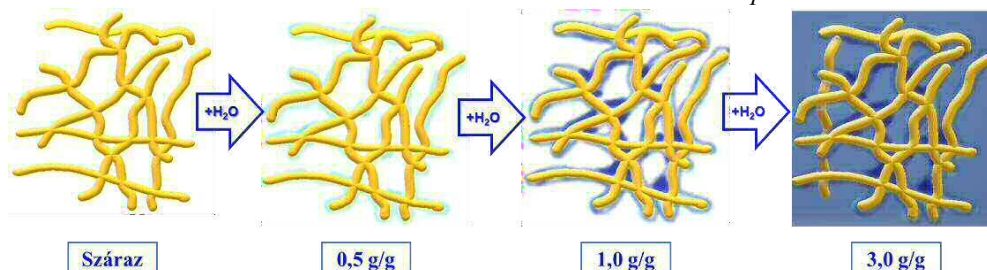
Acknowledgments: We would like to thank Dr. Veronika Hanyecz for her help in the Au underlayer deposition procedure. This project has received funding under the European Union's Horizon 2020 research and innovation program from the European Research Council (ERC, Grant Agreement #899747) and under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement no. 861151 Solar2Chem. The Authors also thank the Hungarian support through the project no. RRF-2.3.1-21-2022-00009, titled National Laboratory for Renewable Energy. This has been implemented with the support provided by the Recovery and Resilience Facility of the European Union within the framework of Programme Széchenyi Plan Plus. The ELI ALPS project (GINOP-2.3.6-15-2015-00001) is supported by the European Union and co-financed by the European Regional Development Fund.

ANYAGTUDOMÁNY SZEKCIÓ III.

Poliimid aerogélek hidratációs mechanizmusának vizsgálata

Ecsédi Bertold^a, Forgács Attila^a, Moldován Krisztián^a, Fábián István^a, Kalmár József^a

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport



Az aerogélek a világ legkisebb sűrűségű szilárd anyagai, melyek nagy porozitással és fajlagos felülettel rendelkeznek, mindemellett kitűnő elektromos és hőszigetelő anyagok.

Felhasználásuk során sok esetben kerülhetnek nedves levegőbe, vagy vizes környezetbe, ami miatt elengedhetetlen a hidratációjuk tanulmányozása, melyet különböző nemkonvencionális folyadékfázisú NMR technikákkal valósítottunk meg [1]. Jelen előadásban két eltérő mechanikai tulajdonságokkal rendelkező, poliimid alapú aerogél hidratációját vizsgáltuk, melyek közül az egyik rigid, a másik flexibilis sajátságot mutat [2].

Mindkét aerogél térhálós polimerek nanométeres láncából épül fel, melyek nehezen definiálható pórusgeometriát alakítanak ki, amit a pásztázó elektronmikroszkópiás felvételek is mutatnak. Mind a N₂ adszorpciós-deszorpciós porozimetria, mind az NMR krio-porozimetria alapján elmondható, hogy mindkét aerogél pórusai főként a mezopórusos mérettartományba esnek ($d_{\text{pórus}} = 2 - 50 \text{ nm}$), de megtalálhatók bennük makropórusok is.

Az NMR relaxometriás vizsgálatok során három különböző kémiai környezetben található víz-tartományt (domént) különítettünk el mindkét esetben. Ki víztartalomnál két domén jelenlétét detektáltuk, melyek kis transzverzális relaxációs időekkel rendelkeznek (T_2), majd további hidratáció hatására megjelent egy harmadik domén is jelentősen nagyobb T_2 értékekkel. Az NMR diffúziómetriás vizsgálatok bebizonyították, hogy az egyes domének között közepesen gyors kémiai csere játszódik le. A kisebb relaxációs időekkel rendelkező domének a polimerszálakhoz közvetlenül kötődő, ezeket részben feloldó víz jelenlétet jelzik, a harmadik domént pedig a pórusokat kitöltő tömbfázisszerű víz adja.

A krio-porozimetriás vizsgálatok, a szilárd fázisú NMR mérések és az NMR diffúziómetriás vizsgálatok alapján összeségében elmondható, hogy a pórusszerkezet és a morfológia nem változik jelentősen hidratáció hatására.

Hivatkozások:

- [1] Allen, S. G., Stephenson, P. C. L., & Strange, J. H. (1997). Morphology of porous media studied by nuclear magnetic resonance. *Journal of Chemical Physics*, 106(18), 7802-7809.
- [2] Simina, M., Nechifor, R., & Ardelean, I. (2011). Saturation-dependent nuclear magnetic resonance relaxation of fluids confined inside porous media with micrometer-sized pores. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 49(6), 314-319.

Polikationos nanoszálás rendszerek fejlesztése elektrosztatikus szálhúzás technikával

Takács Ádám^a, Juriga Dávid^a

Semmelweis Egyetem Budapest Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet Nanokémiai Kutatócsoport 1089 Budapest, Nagyvárad tér 4.

Az elektrosztatikus szálképzés napjaink egyik széles körben használt eljárása nanoszálás rendszerek előállítására. Ezen rendszerek nagy fajlagos felülettel rendelkeznek, így alkalmazásukra a gyógyszerészet, orvostudomány, vagy akár az elválasztástechnika terén is találunk példát. Töltéssel rendelkező szálás rendszerek alkalmazása új lehetőségekkel bírhat, azonban polielektrolit szálás rendszerek előállítása elektrosztatikus szálképzéssel nehéz. Ezen problémára megoldást nyújthat valamilyen inert vivő polimer keverése az adott polielektrolithoz. Továbbá a polielektrolitok nagy vízoldhatósága korlátozza alkalmazási lehetőségeiket, de ez kiküszöbölhető keresztkötések kialakításával a szálakban.

Munkám célja pozitív töltéssel rendelkező nanoszálás rendszerek előállítása elektrosztatikus szálképzéssel különböző arányú polikaprolakton (PCL) és poli(etilén imin) (PEI) oldatok alkalmazásával, illetve a szálás rendszerek fizikai és kémiai vizsgálata és karakterizálása.

Az elektrosztatikus szálképzéssel előállított szálak kémiai szerkezetét Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiával (FTIR) vizsgáltam kétféle mérési eljárással (átmenő infravörös és ATR fejes mérés). Ezen vizsgálatokon túl a minták térhálósítását glutáraldehiddel végeztem, majd a kémiai szerkezetben bekövetkező különbségeket FTIR spektroszkópiával mértem. Mértem a sima és a keresztkötött szálás rendszerek mechanikai tulajdonságait egyirányú erő-deformációs mérésekkel, továbbá az elkészült mintákat pásztázó elektronmikroszkópiával vizsgáltam.

A paraméterek optimalizálásával sikeresen hoztam létre különböző összetételű szálás rendszereket. Az FTIR vizsgálatok bebizonyították, hogy a PEI jelen van a kialakult szálakban. A keresztkötött szálak vizsgálatai során a kétféle technikával mért FTIR spektrumok a kémiai szerkezetben bekövetkező változást a glutáraldehid kezelésnek köszönhetően, ami a kialakult keresztkötésekre utal. A mikroszkópos vizsgálatok alapján elmondható, hogy a PCL és PEI aránya, valamint a keresztkötés befolyásolja a szálak fizikai megjelenését. A mechanikai vizsgálatok rámutattak, hogy a PCL-hez adott PEI, illetve a keresztkötés megváltoztatja a szálak teherbírását és deformálhatóságát.

Eredményeim alapján elmondható, hogy sikeresen hoztam létre töltéssel rendelkező nanoszálás rendszereket, melyek alkalmazhatóak lehetnek elválasztástechnikában és utat nyithatnak biológiai makromolekulák izolálása során.

Az uranil kation és a réteges kettős hidroxidok közötti kölcsönhatások vizsgálata

Péter Tamás, Takács Dóra, Szilágyi István

MTA-SZTE Biokolloidok Kutatócsoport, 6720 Szeged Rerrich Béla tér 1

Az uránbányászatból származó szennyeződések szennyvízből való eltávolítása rendkívül fontos környezetvédelmi és társadalmi szempontból. A réteges kettős hidroxidok (LDH) képesek a különböző urán vegyületeket, különösen az uranil kationt (UO_2^{2+}) a kristály szélső részén megkötni, ezáltal eltávolítható, stabil, szilárd formává alakítani a szennyező anyagokat. A kutatásunk során vizsgáltuk az uranil kation és a réteges kettős hidroxidok közötti kölcsönhatásokat, különböző körülmények között előállított LDH-t és (UO_2^{2+})-t tartalmazó rendszerek segítségével. Az LDH-t $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$ és $\text{Al}(\text{NO}_3)_3$ koprecipitációja által állítottuk elő pH növelés következtében. Az így előállított részecskéket referenciamintaként használtuk fel, melyet az uranilt tartalmazó LDHU és ULDH mintákkal hasonlítottuk össze. Az LDHU részecskéket, LDH kialakulása után a rendszerhez $\text{UO}_2(\text{CH}_3\text{CO}_2)_2$ -ot adagolva állítottuk elő, míg az ULDH előállításakor mindhárom sót egyszerre oldottuk fel. Az ULDH segítségével vizsgálni tudtuk az LDH in-situ kialakulását uranil tartalmú közegben. A szintézist követően megvizsgáltuk az előállított részecskék szerkezeti és morfológiai jellemzőit. Az ULDH és LDHU csapadékban, az LDH mellett egy további fázis a schoepite ($\text{UO}_2)_8\text{O}_2(\text{OH})_{12} \cdot 12(\text{H}_2\text{O})$ is megjelent. Megállapítottuk, hogy az uranil tartalmú mintákban a referenciamintához képest lényegesen kisebb méretűek a részecskék, ami alapján az uranil kation korlátozó hatást gyakorol az LDH kristálynövekedésére. Ezt követően négy különböző só, a NaCl , Na_2CO_3 , Na_2SiO_3 és a Na_3PO_4 hatását vizsgáltuk az LDH, ULDH, és LDHU részecskék felületi töltésére, és aggregációs viselkedésére. A Na_2SiO_3 és a Na_3PO_4 esetében jelentős felületi áttöltődést figyeltünk meg, mely a részecskék közötti erős taszításhoz, és így egy stabil diszperzió kialakulásához vezetett. A Na_2CO_3 nem képes elegendően nagy felületi áttöltődést okozni a stabil rendszer kialakulásához. A kapott eredmények alapján megállapítottuk, hogy az uranil kation jelenléte jelentősen kihat az LDH részecskék felületi tulajdonságaira, ezáltal pedig befolyásolja a rendszer aggregációs viselkedését.

Köszönetnyilvánítás: Ezúton szeretném megköszönni a Márton Áron Szakkollégiumnak az anyagi támogatást, melyet a kutatás során nyújtottak.

Polietilén stabilizálása természetes eredetű antioxidánsokkal

Takács Kata^{a,b}, Tátraaljai Dóra^{a,b}, Pregi Emese^{a,b}, Pukánszky Béla^{a,b}

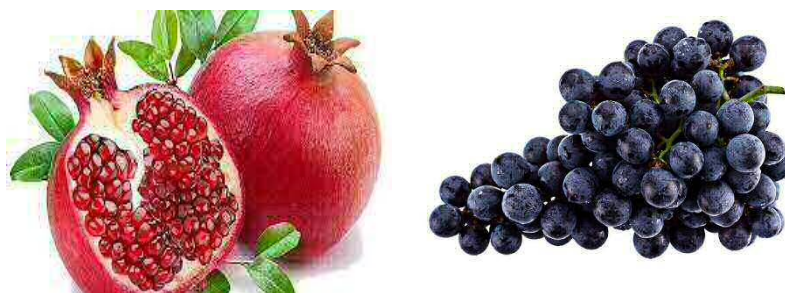
^aTermészettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Polimer Fizikai Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.

^bBME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Műanyag- és Gumiipari Laboratórium, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A műanyag hulladék újrahasznosítása és újrafeldolgozása egyre növekvő fontossággal bír napjainkban. Bár számos lehetőség áll rendelkezésre a polimerek körkörös gazdálkodásának előmozdítására és a hulladék csökkentésére, minden technológiai folyamatnak megvannak a maga kihívásai és nehézségei. Az egyik fő probléma a polimerek fizikai újrahasznosításában a polimerek degradációja.

Kutatócsoportunk több évtizede foglalkozik a polimerek stabilizálásával, és különösen a természetes antioxidánsokkal, mint például, a β -karotin, kvercetin, rutin, szilimarín, kurkumin stb. [1]. Az mezőgazdasági hulladékból származó természetes kivonatok is hatékonyak lehetnek a stabilizálásban. Az egyik ígéretes jelölt a gránátalma héjának kivonata, amely számos antioxidáns hatású komponenst tartalmaz. A gránátalma egy népszerű gyümölcs, amelyet főként Ázsiában termesztene nagy mennyiségben [2]. Szintén ígéretes anyagnak tekinthető a szőlőhéj kivonata a polimerek stabilizálására (1. ábra). Az ilyen kivonatok előállítása egyszerű és költséghatékony, mivel csak szerves oldószerre van szükség, és egyszerű felszereléseket, például keverőtartályt vagy Soxhlet reaktort igényel. Az extraktumban található különböző komponensek és azok arányának változékonysága azonban nehezítheti a mérések ismételhetőségét és az eredmények értelmezését, emiatt szükség van az extraktumok analitikai vizsgálatára és a fő komponensek mélyebb tanulmányozására.

Legfrissebb kutatásunk során a gránátalma- és szőlőhéj-kivonatok hatékonyságát vizsgáltuk a polietilén többszöri extrúziója során. Mindkét kivonatot rendkívül hatékonynak találtuk a feldolgozás körülményei között, ugyanakkor hosszútávú stabilizáló képességük gyenge volt. További célunk, hogy feltárjuk a kivonatok és fő komponenseinek gyökös reakcióit, ezzel magyarázatot találjunk a fenti ellentmondásra.



1. ábra Magas antioxidáns tartalmú gyümölcsök

[1] Kirschweng B., Tátraaljai D., Földes E., Pukánszky B.: *Polym. Degrad. Stab.* **2017** (145), 25-40.

[2] Tátraaljai D., Tang Y., Pregi E., Vági E., Horváth V., Pukánszky B.: *Antioxidants*, **2022** (418), 11(2)

Pénzügyi támogatás: Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal, Magyarország NKFIH, OTKA PD 138507.

FIZIKAI KÉMIA SZEKCIÓ

Kitozángyöngyök kollektív viselkedése

Gárdi Bálint^a, Horváth Dezső^b, Tóth Ágota^a

^a*Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

^b*Alkalmazott és Környezeti Kémia Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

Kollektív viselkedéssel környezetünk bármely részében találkozhatunk: a szentjánosbogarak összehangolt villogásától, a társadalmi önszerveződésre példaként szolgáló tapsviharon át, egészen a sejtek ön- és létfenntartásukat biztosító mozgási mechanizmusokig. Ezen viselkedésbeli tulajdonságok kémiai rendszerekben történő kutatása és szabályozása során olyan mesterséges, aktív anyagi rendszereket vizsgálunk, melyek közti fizikai kölcsönhatás kémiai reakcióban történő változás által jön létre. Ily módon az adott mozgásformák anyagi minőség és koncentráció függőek.

A kutatómunkánk során kitozánszolt állítottunk elő ecetsavoldat hozzáadásával és azt követő 24 órán keresztüli kevertetéssel. Majd gadolínium-kloridot és etanolt is tartalmazó szolt perisztaltikus pumpa segítségével cseppenként adagoltunk meghatározott töménységű lúgoldatba. A kísérletekről GoPro gyorskamera használatával felvételeket készítettünk, melyekből megfelelő programok segítségével a kapott adatok értékelésével a polimergyöngyök egymással való kölcsönhatását és mozgásuk dinamikáját jellemeztük.

A szol lúgoldatba cseppenésekor a kitozán térszerkezetének megváltozásával gél állapotú úszó gyönggyé alakul. [1] Az etanol lúgoldatbeli diffundálása felületi feszültség csökkenést okoz, mely a gyöngy felszíni mozgását eredményezi. Két kitozán egymás közelébe kerülésekor két hatás határozza meg a további mozgásukat. A kapilláris vonzás miatt a részecskék között vonzó kölcsönhatás lép fel, míg a Marangoni hatás miatt a részecskék egymást taszítják. [2] Amennyiben a vonzó és a taszító kölcsönhatás hasonló nagyságrendű, oszcilláció léphet fel közöttük. Munkánk során különböző méretű és számú kitozángyöngy viselkedését tanulmányoztuk és tér- és időbeli szinkronizációjukat mennyiségileg jellemeztük.

[1] P. Kumar, D. Horváth, Á. Tóth: *Chaos*, **2022** (6), 063120.

[2] P. Kumar, D. Horváth, Á. Tóth: *Soft Matter*, **2023** (22), 4137-4143.

Kalcium-karbonát képződésének tér- és időbeli jellemzése mikrofluidikai reaktorban

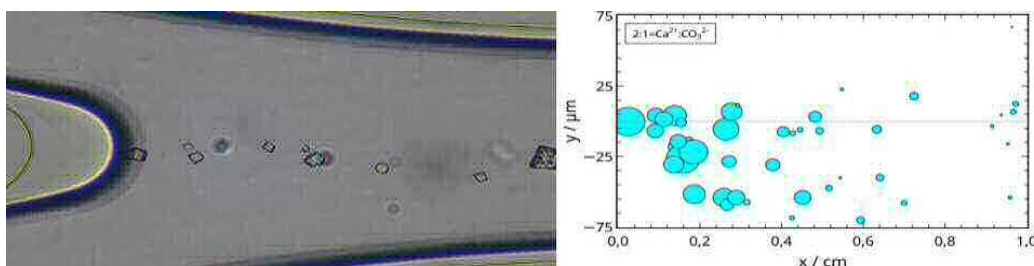
Ádám Mária Rebeka^a, Papp Paszkál^a, Tóth Ágota^a

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

A kalcium-karbonát az egyik leggyakrabban előforduló természetes anyag a Földön, ezért az egyik leginkább tanulmányozott vegyület is. Képződése fontos szerepet tölt be a biomineralizációban, ahol a kristály többféle szerkezettel és morfológiával jelenhet meg, így elengedhetetlen a kalcium-karbonát polimorfok nukleációjának és az azt követő kristálynövekedés mechanizmusának és sebességének tanulmányozása. Az áramlásvezérelt mikrofluidikai csatornák egy jól kontrollálható környezetet biztosítanak az ilyen típusú mérések megvalósításához. [1]

A munkánk során a kalcium-karbonát képződését vizsgáltuk áramlásvezérelt mikrofluidikai rendszerben különböző oldatkonzentrációknál. Majd a kiválasztott részecskék kristálynövekedését jellemeztük mennyiségileg.

A mérések során a kalcium-karbonát polimorfjai közül mindig megjelent a kalcit, bizonyos esetekben fordult elő vaterit, míg aragonit módosulatot a vizsgálatok során nem tapasztaltunk (ld. 1. ábrát). Minden alkalmazott koncentrációarálynál a göcképződés térben, a mikrofluidikai csatorna lúgosabb tartománya felé tolódott el. A kiválasztott kalcitkristályok terület-, illetve oldalnövekedésének követéséből meghatároztuk növekedési sebességüket. Megfigyeléseink azt mutatják, hogy a csatorna bevezető nyílásához közelebb elhelyezkedő részecskék gyorsabban nőnek, mint a távolabb lévők. Továbbá a nukleáció korai szakaszában vizsgált kristályok esetén megállapítottuk, hogy oldalnövekedésük az idő négyzetgyökével arányos, ami arra enged következtetni, hogy a kristálynövekedés diffúzióvezérelt. Számolásaink alapján bizonyítottuk, hogy a részecskék növekedési sebessége független a kristályok orientációjától és az oldatkonzentrációk arányától.



1. ábra. Kristályképződés mikroszkópos képe (bal); a vizsgált kristályok térbeli elhelyezkedése a mikrofluidikai csatornában, ahol a pontok nagysága a területnövekedési sebességüket, míg a vízszintes szaggatott vonal a csatorna közepét jelöli $[Ca^{2+}]:[CO_3^{2-}]=2:1$ aránynál.

Szén-dioxid redukcióval párosított glicerín oxidáció folyamatos áramlásos elektrolizáló cellában

Szirmai Adrienn^a, Janáky Csaba^a, Endródi Balázs^a, Kormányos Attila^a

^aSzegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Az elmúlt évtizedben egyre nagyobb a kutatási érdeklődés a glicerín elektrokémiai úton történő átalakítására, mely elsősorban a biodízel növekvő termelésének köszönhető. A glicerín nagy mennyiségben keletkezik a biodízel-előállítás melléktermékeként, mely így egy relatíve tiszta és olcsó alapanyaggá teszi értéknövelt termékekké alakításához. Erre korábban nem elektrokémiai módszerek alkalmazásával már történtek kísérletek, azonban ezen módszerek számos hátránnyal rendelkeztek, például nagy hőmérséklet, illetve nyomás alkalmazását igényelték. Ezekkel ellentétben a glicerín elektrokémiai oxidációja (GOR) enyhe körülmények között hajtható végre (szobahőmérsékleten, légköri nyomáson) további reagens nélkül.

A szén-dioxid elektrolizáló cellák energiahatékonysága jelenleg még relatíve kicsi a kialakuló nagy cellafeszültség miatt. Ennek oka az anódon hagyományosan alkalmazott víz oxidációs reakció. Ez a probléma kiküszöbölhető, ezen reakció lecserélésével alternatív anód folyamatokra, pl. a glicerín elektrokémiai oxidációjára. Ez egyfelől lehetőséget biztosít kisebb cellafeszültség kialakulására, másfelől egy, jelenleg hulladékként kezelt anyagot (Magyarországon is releváns probléma) alakítunk át értékes vegyipari alapanyagokká.

Munkánk során a CO₂ elektrokémiai redukcióval (CO₂RR) párosított GOR rendszert vizsgáltuk. A folyamatos áramlásos mikrofluidikai elektrolizáló cellában (1 cm² aktív felület) hordozóként Freudenberg H23C6 típusú szénpapírt alkalmaztunk, melyre katalizátorként az anódra szénhordozós platina, a katódra pedig ezüst réteget vittünk fel porlasztva fűjásos technikával. Céljaink között szerepelt a katalizátor glicerín oxidációs aktivitásának és szelektivitásának vizsgálata. Feltérképeztük, hogy ezek hogyan függenek a katalizátorrétegbe épített ionomer mennyiségétől és minőségétől, a glicerín koncentrációtól, az elektrolit áramlási sebességétől, illetve az alkalmazott anód potenciáltól. Megmutattuk, hogy az anódfolyamatot a vízoxidációról glicerín oxidációra cserélve a szén-dioxid elektrolizáló cellában mérhető cellafeszültség jelentősen csökkent. Az áthaladt töltés közel 100%-a szén-monoxid fejlődésére fordítódott a katódon, melyet a glicerín és a glicerín oxidációs termékek jelenléte nem befolyásolt. Glicerín oxidációs termékeként a folyadék fázisban NMR spektroszkópiával és nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiával glicerátot, dihidroxi-acetont, glikolátot, tartronátot, oxalátot, formiátot és laktátot azonosítottunk. A CO₂RR/GOR folyamat hosszú távú stabilitását potenciostatikus mérésekkel vizsgáltuk. Az áramsűrűség fokozatos csökkenését tapasztaltuk, amikor a potenciált egy adott értéken tartottuk, melyet a platina felületének fokozatos oxidációjához és a GOR termékek általi mérgeződéséhez kötöttünk. A katalizátor aktivitása megőrizhető, ha a Pt felületét periodikusan (az általunk használt elrendezésben 25 percenként) redukáljuk. Ezt a dinamikus elektrokémiai protokollt alkalmazva az anód katalizátor aktivitása (200 mA cm⁻² áramsűrűség feletti értékek) és szelektivitása megőrizhető, azonban a platina periodikus oxidációja/redukciója annak fokozatos kioldódásához vezet.

Kutatómunkánk során azonosítottuk azt a paraméter együttest, melynek alkalmazásával a szén-dioxid redukcióval párosított glicerín oxidációs folyamat hosszú távon, iparilag releváns áramsűrűségeken és állandó szelektivitással végrehajtható. Tapasztalataink felhasználhatók többek között más alternatív anód folyamatok vizsgálata, illetve akár a technológia potenciális ipari alkalmazása során.

Fotoelektrokémiai glicerinoxidációs folyamatok nagy áramsűrűségeken

Fekete Dávid^a, Balog Ádám^a, Janáky Csaba^a

^aSzegedi Tudományegyetem Fotoelektrokémiai Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1

A globális klímaváltozás problémájára megoldást nyújthat a légköri CO₂ megkötése és továbbalakítása. Az átalakításra a CO₂ elektrokémiai redukciója egy jó lehetőség lehet, főleg, ha sikerül találni mellé egy megfelelő anódreakciót. A biodízelgyártás során hatalmas mennyiségben melléktermékként keletkező glicerín oxidálása egy ilyen anódreakció lehet, mert az alapanyag olcsón, nagy mennyiségben áll rendelkezésre, és a keletkező termékek magas értékkel rendelkeznek. Ráadásul, ha mindezt fotoelektrokémiai úton hajtjuk végre, a napenergia kihasználásának segítségével csökkenthetjük a folyamathoz szükséges hálózati elektromos energiát. Azonban a fotoelektrokémiai cellák csak akkor tudják felvenni a versenyt a sötét elektrokémiai cellákkal, ha az elért áramsűrűségek drasztikusan megnövekednek. Erre nyújthat megoldást, ha a félvezetőnket koncentrált napfénnel világítjuk meg. Emiatt fontos olyan félvezetők keresése, melyekkel nagy áramsűrűségek érhetők el stabilan, koncentrált fény alkalmazása mellett.

A munkám első felében egy Si alapú fotoanódot tartalmazó áramlásos fotoelektrokémiai cellát vizsgáltam. Megállapítottuk, hogy a fényintenzitás növelésével az elért fotoáramok megnőnek, azonban ez hatással van a cellafeszültségre és a glicerinoxidációs termékeloszlásra is, utóbbira azért, mert megváltozik a reakciósebesség. A katódreakció a fotoelektród stabilitását befolyásolja, ugyanis, ha a katódon CO₂ redukciót hajtunk végre vízredukció helyett, akkor az anódtérbe átjutó karbonátionok miatt az anolít pH-ja lecsökken, mely a Si felületén lévő Ni katalizátor leoldódásához vezet. Végül azt is bemutattuk, hogy azonos áramnál a fotoelektrokémia alkalmazásával kisebb a cellafeszültség (vagyis a befektetett hálózati energia) a sötét elektrokémiai oxidációhoz viszonyítva, valamint a termékeloszlás is eltér.

A második szakaszban olyan félvezetőket kerestünk, amelyek kedvezőbb sávpozícióik miatt alacsonyabb potenciálon képesek a glicerinoxidációra, mint a Si, ezáltal tovább csökkentve a folyamathoz szükséges külső energia mennyiségét. A GaAs irodalmi adatok alapján ideális jelöltnek tűnt, azonban gyors fotokorróziót mutatott. Stabilizálására több módszert is kipróbáltunk, viszont egyikkel sem sikerült megfelelő eredményt elérni. A másik fotoanódjelölt a Ta₃N₅ volt. Sikerült nanorudas szerkezetű, Ta₃N₅ alapú fotoanódot előállítanunk, és az első mérések alapján valóban alacsonyabb potenciálon képes a glicerinoxidációra, ahogy azt a sáv szerkezete is jósolja. Azonban a fotoanód szintézisének tökéletesítéséhez további kutatások szükségesek.

Ritkaföldfém-szilikát csövek áramlásvezérelt szintézise és jellemzése

Farkas Panna^a, Tóth Ágota^a

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

A „Vegyészek virágoskertje” kísérlet egy látványos példa a kristálymagos csapadécsőképző rendszerek bemutatására [1]. Ilyen, és ehhez hasonló önszerveződő rendszerek a természetben változatos módon fordulnak elő. A csőnövekedés hajtóerejének megfigyelése, kvalitatív és kvantitatív leírása azonban nem egyszerű a reprodukálhatóság hiánya miatt. Az áramlásvezérelt csőképző rendszerek lehetőséget biztosítanak ennek kiküszöbölésére, olyan mérések kivitelezésére, melyek során a rendszerre ható tényezők közül a legtöbbet állandósítva figyelhető meg egy változó hatása a csőnövekedésre.

Munkánk során ritkaföldfém-sóoldatot áramoltattunk nátrium-szilikát oldatba, így lentől felfele növekvő, fehér színű csapadécsövek képződését tapasztaltuk. Négyféle ritkaföldfém sóval (neodímium, diszprózium, cérium és gadolínium) végeztük a kísérleteket, változtatva az oldatok koncentrációját és a beáramoltatás sebességét. Megfigyeltük a csövek alakját, felületét szabad szemmel, valamint pásztázó elektronmikroszkóppal vizsgálva, mennyiségileg jellemeztük a csövek lineáris-, valamint térfogatnövekedési sebességét.

Megállapítottuk, hogy a csövek lineáris- és térfogatnövekedési sebességei nagyságrendi különbséget mutatnak a ritkaföldfém-sóoldat koncentrációjától függően, valamint tendenciális változás figyelhető meg a nátrium-szilikát oldat koncentrációjának változásával. A kialakult csövek makroszerkezetének típusát a ritkaföldfém-sóoldat koncentrációja határozza meg, de a szilikátoldat koncentrációja, valamint a beáramoltatás sebessége befolyásolja a keletkezett csövek méretét. A mikroszerkezet az anyagi minőségtől és a térfogatáramlási sebességtől független, minden cső külső felülete egyenletes, míg belső felületén valamilyen mikroméretű tú- vagy virágszerű mintázat figyelhető meg.

[1] J. H. E. Cartwright, J. Čejková, L. Cronin, A. D. Wit, S. Giannerini, D. Horváth, A. Rodrigues, M. J. Russell, C. I. Sainz-Díaz, Á. Tóth, "Chemobionics: From self-assembled material architectures to the origin of life", *Artif. Life*, **2020** (26), 315--326

A $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{CN}$ reakció mechanizmusainak és dinamikájának elméleti modellezése

Tóth Petra, Szűcs Tímea, Czakó Gábor

*MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék,
Szegedi Tudományegyetem, Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

Munkánk első lépéseként a $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{CN}$ rendszer potenciálisenergia-felületének (PES) stacionárius pontjait térképeztük fel. A lehetséges reakcióutak a hidrogén-absztrakció, metil-szubsztitúció, hidrogén-szubsztitúció és cianid-szubsztitúció, melyek sorban a következő termékekhez vezetnek: $\text{HCl} + \text{CH}_2\text{CN}$, $\text{ClCN/CNCl} + \text{CH}_3$, $\text{ClCH}_2\text{CN} + \text{H}$ és $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{CN}$. Az egyetlen exoterm reakció a hidrogén-absztrakció, a többi mind endoterm. Meghatároztuk a benchmark klasszikus és rezgésileg adiabatikus relatív energiákat a legpontosabb, CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVQZ értékek felhasználásával további korrekciókat is figyelembe véve. Ezek a zérusponti-energia korrekció, a (T)-n túli elektronkorreláció, a skaláris relativisztikus effektus, a törzselektron korreláció és a spin-pálya csatolás. Az eredményekre alapozva egy teljes dimenziós analitikus potenciálisenergia-felületet fejlesztettünk permutációra invariáns polinóm megközelítést és a ROBOSURFER programcsomagot alkalmazva. Trajektória szimulációkat futtattunk kvázi-klasszikus közelítést alkalmazva a PES-en különböző ütközési energia és impakt paraméter értékeket beállítva. Ezek alapján meghatározható például a reakcióvalószínűség, az integrális hatáskeresztmetszet és a szórási szög eloszlás.

[1] Petra Tóth, Tímea Szűcs, Gábor Czakó: *J. Phys. Chem. A*, **2022** (126) 2802-2810.

Munkánkat támogatta a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (K-125317), a TKP2021-NVA-19 számú projekt az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával és a Magyar Tudományos Akadémia Lendület programja.

A KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS MINISZTERIUM ÚNKP-23-2 - KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL FINANSZÍROZOTT SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.



Magyar Kémikusok Egyesülete



Magyar Kémikusok Egyesülete
Csongrád Megyei Csoport



2023. ÉVI KÉMIAI ELŐADÓI NAPOKAT TÁMOGATTÁK:



Egis Gyógyszergyár Zrt.



Magyar Tudományos Akadémia
Szegedi Akadémiai Bizottság

Szegedi Tudományegyetem TTIK Kémiai Intézet



Fornetti Kft.



Bodrogi Bau Kft.

