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

XLIII. KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK

Programfüzet



Szegedi Tudományegyetem
Szeged, 2020. október 27-28.

Szerkesztették:

Böszörményi Éva

SZTE TTIK Szervetlen Kémiai és Analitikai Tanszék

Kocsis Marianna

SZTE TTIK Szerves Kémia Tanszék

A MAGYAR KÉMİKUSOK EGYESÜLETE
ÁLTAL A 2020. ÉVBEN NÍVÓDÍJJAL KITÜNTETETT
DIPLOMADOLGOZATOK

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM

DRASKÓCZI ÁDÁM: Réz(I)-oxid tartalmú szol-gél bevonatok kialakítása és jellemzése

ENYEDI FLÓRIÁN: Folyamatos üzemű desztilláló oszlop IOT alapú szabályozás

DEBRECENI EGYETEM

FERENCZIK GERGŐ TAMÁS: Deferasinox származékok és komplexeik szintézise és vizsgálata

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

BUGYI FANNI: Kismennyiségű fehérjekeverékek foszforilációjának vizsgálatára alkalmas dúsítási módszerek fejlesztése

PANNON EGYETEM

EGRI SZABOLCS: Hőszigetelő sajátságú, alkáli aktivált cementbázisú, adalékolással és/vagy habosítással készült kompozitok előállítása és vizsgálata

PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM

SZERENCSÉS DÉNES: A termodinamikai paraméterek meghatározásának bizonytalansága nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiában

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

BINDER ADRIENN: Ortogónálisan védett ciklusos aminosav-származékok szelektív szintézisei

TAKÁCS DÓRA: Kolloid részecskék stabilitásának hangolása ionos folyadékok jelenlétében

SEMMELWEIS EGYETEM

VÁRNAI BIANKA: Molekuláris kölcsönhatások jellemzése fondaparinux-ciklodextrin rendszerekben

ÁTTEKINTŐ PROGRAM

XLIII. KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK

2020. október 27–28.

2020. október 27. kedd

Helyszín: Online

08.30 – Regisztráció

09.00 – 9.30 Megnyitó

Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*

A Magyar Kémikusok Egyesülete

Csongrád Megyei Csoportjának elnöke

Dr. Szilágyi István, *egyetemi adjunktus*

A Magyar Kémikusok Egyesülete

Csongrád Megyei Csoportjának titkára

Nívódíjak átadása

Dr. Pálinkó István, *egyetemi tanár*

A Magyar Kémikusok Egyesületének főtitkára

09.30 – 10.30 Plenáris előadás

Előadó: Dr. Fábián István, *egyetemi tanár*

Debreceni Egyetem,

Szervetlen és Analitikai Kémiai tanszék

10.30 – 10.45 Szünet

10.45 – 12.15 Nívódíjas előadások szekciója

Elnök: Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*

12.15 – 12.30 Szünet

12.30 – 14.30 Szerves kémia szekció I.

Elnök: Dr. Mernyák Erzsébet, *egyetemi adjunktus*

14.30 – 14.45 Szünet

14.45 – 16.30 Anyagtudományi szekció

Elnök: Dr. Kónya Zoltán, *egyetemi tanár*

2020. október 28. szerda

Helyszín: Online

08.00 – 09.15 English section

Chairman: Dr. Janáky Csaba, *egyetemi docens*

09.15 – 09.30 Szünet

- 09.30 – 10.30 Szervetlen és Analitikai kémia szekció**
Elnök: Dr. Alapi Tünde, egyetemi adjunktus
- 10.30 – 10.45 Szünet**
- 10.45 – 12.45 Fizikai kémia szekció**
Elnök: Dr. Czakó Gábor, egyetemi docens
- 12.45 – 13.00 Szünet**
- 13.00 – 15.00 Szerves kémia szekció II.**
Elnök: Dr. Wölfling János, egyetemi tanár
- 15.00 – 15.15 Szünet**
- 15.15 – 16.45 Környezeti kémia szekció**
Elnök: Vidákné Dr. Tóth Ildikó, egyetemi adjunktus

RÉSZLETES PROGRAM

2020. október 27. kedd

Helyszín: Online

08.30 – Regisztráció

09.00 – 09.30 Megnyitó

Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*

*A Magyar Kémikusok Egyesülete
Csongrád Megyei Csoportjának elnöke*

Dr. Szilágyi István, *egyetemi adjunktus*

*A Magyar Kémikusok Egyesülete
Csongrád Megyei Csoportjának titkára*

Nívódíjak átadása

Dr. Pálinkó István, *egyetemi tanár*

A Magyar Kémikusok Egyesületének főtitkára

09.30 – 10.30 Plenáris előadás

Csodavizek és csodasók

Előadó: Dr. Fábíán István, egyetemi tanár

Debreceni egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

10.30 – 10.45 Szünet

10.45 – 12.15 Nívódíjas előadások szekciója

Elnök: Dr. Sipos Pál, egyetemi tanár

10.45 – 11.00 Réz(I)oxid tartalmú szol-gél bevonatok kialakítása és jellemzése

Előadó: Draskóczy Ádám

11.00 – 11.15 Deferasirox származékok és komplexeik szintézise és vizsgálata

Előadó: Ferencsik Gergő Tamás

11.15 – 11.30 Kismennyiségű fehérjekeverékek foszforilációjának vizsgálatára alkalmas dúsítási módszerek fejlesztése

Előadó: Bugyi Fanni

11.30 – 11.45 Tuning particle stability in aqueous solutions of ionic liquids

Előadó: Takács Dóra

11.45 – 12.00 Molekuláris kölcsönhatások jellemzése fondaparinux-ciklodextrin rendszerekben

Előadó: Várnai Bianka

12.00 – 12.15 A termodinamikai paraméterek meghatározásának bizonytalansága nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiában

Előadó: Szerencsés Dénes

12.15 – 12.30 Szünet

12.30 – 14.30 Szerves kémia I. szekció

Elnök: Dr. Mernyák Erzsébet, egyetemi adjunktus

12.30 – 12.45 Új fluoreszcens β -karbolin-származékok

Előadó: Szepesi Kovács Dénes

- 12.45 – 13.00 Új α -hidroxi-etilénbiszfoszfónát-származékok előállítása Al_2O_3 felületén
Előadó: Varga Petra Regina
- 13.00 – 13.15 Különféle α -hidroxifoszfónátok és analogonok savas hidrolízisének vizsgálata
Előadó: Harsági Nikoletta
- 13.15 – 13.30 Tiolok és származékaik előállítása elemi kénnel elektronhiányos kettős kötést tartalmazó vegyületekből
Előadó: Szabó Renáta
- 13.30 – 13.45 Új kovalens immunoproteozóma inhibitorok azonosítása
Előadó: Kollár Levente
- 13.45 – 14.00 CH-savas vegyületek acilezése
Előadó: Gulyás Kinga
- 14.00 – 14.15 Szekunder foszfin-oxidok és H-foszfinátok rezolválása és átalakítási lehetőségeik
Előadó: Varga Bence
- 14.15 – 14.30 Fluortartalmú építőelemek szintézise metatézis reakciók alkalmazásával
Előadó: Benke Zsanett Amália
- 14.30 – 14.45 Szünet
- 14.45 – 16.30 **Anyagtudományi szekció**
Elnök: Dr. Kónya Zoltán, egyetemi tanár
- 14.45 – 15.00 Lapcentrált köbös (fcc) és sűrű illeszkedésű hexagonális (hcp) kristályrácsú Ni nanorészecskék előállítása és felhasználása
Előadó: Ádám Anna Adél
- 15.00 – 15.15 Szérum albumin-hialuronsav alapú komplex hatóanyagrendszerek
Előadó: Kovács Nikoletta Alexandra
- 15.15 – 15.30 Mechanokémia a katalízis szolgálatában: perovszkit szerkezetű anyagok és keverék fém-oxidok előállítása és vizsgálata
Előadó: Kozma Gábor
- 15.30 – 15.45 A fekete foszfor ismételt oxidációjának és redukációjának hatása a szerkezetre
Előadó: Bartus Pravda Cora
- 15.45 – 16.00 Bór-nitrid nanorészecskék kolloid stabilizálása polielektrolitokkal
Előadó: Stumpfne Vásárhelyi Livia
- 16.00 – 16.15 3D poliszukcinimid hálók létrehozása elektrosztatikus szálképzéssel szervesetlen sók jelenlétében
Előadó: Hummel Dávid
- 16.15 – 16.30 Fenilalanin ammóniáliáz immobilizálása politejsav alapú nanoszálal rendszerekben
Előadó: Koplányi Gábor

2020. október 28. szerda

Helyszín: Online

08.00 – 09.15 English section

Chairman: Dr. Janáky Csaba, egyetemi docens

08.00 – 08.15 The colloid stability and enzymatic activity of Prussian blue nanoparticles immobilized onto polystyrene latex particles

Presenter: Nizar B. Alsharif

08.15 – 08.30 Immobilization of an antioxidant enzyme cascade on titania nanosheets

Presenter: Sáringer Szilárd

08.30 – 08.45 Interaction of half-sandwich (Cp*)Rh(III) cation with histidine peptides and their ternary species with (N,N) bidentate ligands

Presenter: Azza Hassoon

08.45 – 09.00 Comparative solution study on estrone salicylaldehyde (thio)semicarbazones and their copper complexes: impact of hybridization and methylation

Presenter: Tatsiana V. Petrasheuskaya

09.00 – 09.15 Synthesis of novel thioglycosides via photoinitiated thiol-ene addition reaction

Presenter: Kelemen Viktor

09.15 – 09.30 Szünet

09.30 – 10.30 Szervetlen és Anilitikai kémia szekció

Elnök: Dr. Alapi Tünde, egyetemi adjunktus

09.30 – 09.45 A 2,4-dipikolinát félszendvics ródium és ruténium komplexei: oldategyensúly és szerkezet

Előadó: Mészáros János Péter

09.45 – 10.00 A COTI-2 és származékainak oldatkémiai vizsgálata: komplexképződés vas(III)-, réz(II)-ionokkal

Előadó: Pósa Vivien

10.00 – 10.15 In situ kinetikai oldhatóság mérés UV-szonda segítségével

Előadó: Tózsér Petra

10.15 – 10.30 Meloxicam tartalmú tabletták in vitro kioldódási profiljainak prediktálása gépi látást alkalmazó rendszerrel

Előadó: Mészáros Lilla Alexandra

10.30 – 10.45 Szünet

10.45 – 12.45 Fizikai kémia szekció

Elnök: Dr. Czakó Gábor, egyetemi docens

10.45 – 11.00 A részecskeméret-csökkenés hatása a kioldódásra és az oldhatóságra

Előadó: Csicsák Dóra

11.00 – 11.15 Telmisartan fizikai-kémiai paramétereinek vizsgálata, pH függő oldhatóságának anomáliái és azok magyarázata

Előadó: Kádár Szabina

- 11:15 – 11:30 Egy új dinukleáris nikkel-komplex, mint potenciális NiSOD modell
Előadó: Bonczidai-Kelemen Dóra
- 11:30 – 11:45 Folyékony szerves vegyületek, mint hidrogéntároló rendszerek: Ir(I)-NHC komplexek aktivitása hidrogénezési-dehidrogénezési reakciókban
Előadó: Orosz Krisztina
- 11:45 – 12:00 Távolságszeparált kétszeres hibrid sűrűségfunkcionál-elmélet gerjesztett állapotú számításokhoz
Előadó: Mester Dávid
- 12:00 – 12:15 Metanol és szuperkritikus szén-dioxid elegyedési tulajdonságainak vizsgálata számítógépes szimulációs módszerekkel
Előadó: Horváth Réka Anna
- 12:15 – 12:30 Liposzómás hatóanyagok in vitro kioldódási görbéinek nemlineáris modellezése táblázatkezelő alapú eljárással
Előadó: Seres László
- 12:30 – 12:45 Felületi plazmon rezonancia spektroszkópia alkalmazása receptor-ligandum jellegű kölcsönhatások termodinamikai jellemzésére
Előadó: Gombár Gyöngyi
- 12:45 – 13:00 Szünet
- 13:00 – 15:00 **Szerves kémia szekció II.**
Elnök: Dr. Wölfling János, egyetemi tanár
- 13:00 – 13:15 Poli(etilén-tereftalát) bontása visszaforgatható organokatalizátorok segítségével
Előadó: Kiss Johanna
- 13:15 – 13:30 Lipofil oldallánccal módosított cinkona organokatalizátorok
Előadó: Molnár Balázs
- 13:30 – 13:45 Diszubsztituált aminosavakhoz vezető intermedierek enantioszelektív szintézise és optimalizálása
Előadó: Richter Dóra
- 13:45 – 14:00 Potenciális bioaktivással rendelkező cinkonaalapú organokatalizátorok vizsgálata
Előadó: Pósa Szonja Polett
- 14:00 – 14:15 D-galaktózalapú koronaéterek szintézise és alkalmazása aszimmetrikus reakciókban
Előadó: Orbán István
- 14:15 – 14:30 Királis ciklopropán-származékok előállítása szénhidrátalapú koronaéterek felhasználásával
Előadó: Varga Bertalan
- 14:30 – 14:45 AKR1C(1-3) enzimek inhibitorainak vizsgálata molekulamechanikai módszerekkel
Előadó: Antal Attila Patrik
- 14:45 – 15:00 Átmenetifém-katalizált keresztkapcsolási és C-H aktiválási reakciók a 13 α -ösztron sorban
Előadó: Traj Péter
- 15:00 – 15:15 Szünet

- 15.15 – 16.45 Környezeti kémia szekció**
Elnök: Vidákné Dr. Tóth Ildikó, egyetemi adjunktus
- 15.15 – 15.30** N-metilaminosavak reakciója hipoklórossavval: kinetika és mechanizmus
Előadó: Simon Fruzsina
- 15.30 – 15.45** N-klóraminok bomláskinetikája
Előadó: Kiss Eszter
- 15.45 – 16.00** A felületi stabilizáció mechanizmusának szerepe az ezüst nanorészecskék aggregációs viselkedésére bioreleváns körülmények között
Előadó: Bélteky Péter
- 16.00 – 16.15** Elektrokatalizátor előállítása atomi rétegleválasztásos módszerrel
Előadó: Ballai Gergő
- 16.15 – 16.30** UV-powered LED alkalmazása heterogén fotokatalízis során – reaktortervezés, építés és tesztelés
Előadó: Náfrádi Máté
- 16.30 – 16.45** Vákuum-ultraibolya tartományban sugárzó fényforrások hatékonyságának összehasonlítása antibiotikum hatóanyagok átalakítása során
Előadó: Farkas Luca

PLENÁRIS ELŐADÁS

CSODAVIZEK ÉS CSODASÓK

Fábián István

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

A közgondolkodásban egyre hangsúlyosabban jelenik meg a minél egészségesebb életmódra való törekvés. Ezekben a törekvésekben a valóság és a képzelet világa gyakran keveredik, és a hosszú élet iránti vágyódás sokszor felül ír minden racionalitást. Kereskedőcégek sokasága szakosodott ennek az igénynek a „kiszolgálására”. A piacot elárasztották azok a termékek, amik a hirdetések szerint univerzálisan alkalmasak számos betegség kezelésére, illetve megelőzésére. Az esetek döntő többségében ezen termékek hatékonysága nem bizonyított, ugyanakkor a keresletet folyamatosan gerjesztik az áltudományos érvekre alapozott reklámok. A korlátozott természettudományos ismeretek birtokában lévő vevők egyre inkább kiszolgáltatottak a helyzetet kihasználó sarlatánoknak.

Az előadás célja annak bemutatása, hogy a kereskedelmi forgalomban lévő különleges hatásúnak hirdetett ivóvizek és étkezésre használt sók valójában semmivel sem különböznek hagyományos társaiktól. Sőt, esetenként a speciális, s a többinél jobbnak hirdetett termékek potenciális veszélyt jelentenek a fogyasztó számára.

Az előadás részletesen áttekinti a pí-vízzel, oxigénnel dúsított, lúgosított, savasított és egyéb különleges vizekkel kapcsolatos állításokat és egyszerű kémiai érvek alapján cáfolja azokat. Ugyanígy a homeopátiával kapcsolatos tévhitek is elemzésre kerülnek.

A csodasók közül elsősorban a Himalája-só speciálisnak mondott tulajdonságai kerülnek terítékre. Ennek a sónak egyre nagyobb a kultusza, miközben bizonyítható módon semmivel sincs különlegesebb hatása, mint a közönséges asztali sóknak. A só érdekes színét szennyeződésként jelenlévő vegyületek okozzák, amik egészségre nem ártalmasak, de kiemelkedő élettani hatásuk nincs.

NÍVÓDÍJAS ELŐADÁSOK SZEKCIÓJA

RÉZ(I)-OXID TARTALMÚ SZOL-GÉL BEVONATOK KIALAKÍTÁSA ÉS JELLEMZÉSE

Draskóczy Ádám, Tegze Borbála, Hórvölgyi Zoltán

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Fizikai Kémia
és Anyagtudományi Tanszék, Kolloidkémia Csoport,
1111 Budapest, Budafoki út 6-8.*

A réz(I)-oxid egy p-típusú félvezető, mely keskeny tiltott sávjának köszönhetően egy ígéretes látható fényben alkalmazható fotokatalizátor. Munkám során irodalmi leírás alapján készített prekursor-szolokból és poli(vinil-pirrolidon)-nal (PVP) adalékolt rendszereiből Cu_2O -tartalmú bevonatokat alakítok ki üveghordozókon szol-gél módszerrel [1], majd ezeket jellemezve vizsgálom a körülményeknek a minták optikai tulajdonságaira és fázisösszetételére gyakorolt hatását. Célom a magas Cu_2O -tartalmú bevonatok megbízható előállítását lehetővé tévő paraméterek meghatározása.

Tapasztalataim alapján a kondicionálás időtartama 30 perc alatt nem, míg annak hőmérséklete mindig kritikus tényező: 270 °C alatt nem alakul ki kristályos fázis, míg 350 °C felett már a réz(II)-oxid a fő komponens. A legjobb eredmények három réteg 290 °C-os, 10 perces hőkezeléssel történő kialakításával érhetőek el. 0,5 tömegszázaléknyi polimer jelentősen növelte a háromrétegű bevonatok Cu_2O -tartalmát, 1,0% esetén pedig már igen intenzív Cu_2O -csúcsokat kaptam az XRD-diagramokon, kisebb mennyiségű CuO mellett. PVP adalékolása esetén a 290 °C-nál magasabb hőmérsékletű és hosszabb hőkezelések CuO- és Cu-fázisok megjelenését okozták. A kiválasztott bevonat fotokatalitikus aktivitását tesztelve az alkalmazott színezékoldat abszorbanciája 2 óra látható fényvel való bevilágítás után sem csökkent számottevő mértékben. Ugyanezen minta Tauc-diagrammal meghatározott tiltott sáv energiája 2,43 eV. Különböző redukálószeres és receptek alkalmazásával is megkísértem bevonatokat leválasztani üveghordozóra, illetve TiO_2 -bevonatra - egy ilyen kompozit bevonat rendkívül előnyös fotokatalitikus tulajdonságokkal bírna, de ez további vizsgálatokat igényel.

A fenti eredmények alapján 1,0 tömegszázalék PVP-t tartalmazó prekursor-szolokból húzva, 290°C-on és levegőben történő 10 perces hőkezelésekkel, három réteg kialakításával sikeresen állíthatóak elő magas Cu_2O -tartalmú szol-gél bevonatok.

[1] M. A. Badillo-Ávila, R. Castanedo-Pérez, M. A. Villarreal-Andrade, G. Torres-Delgado, *Materials Science in Semiconductor Processing*, **2018** (85) 168–176.

A kutatómunka az Emberi Erőforrások Minisztériuma Felsőoktatási Intézményi Kiválósági Programja (BME FIKP-NAT) és a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (K-128266) támogatásával valósult meg.

DEFERASIROX SZÁRMAZÉKOK ÉS KOMPLEXEIK SZINTÉZISE ÉS VIZSGÁLATA

Ferenczik Gergő Tamás, Nagy Imre, Dr. Buglyó Péter

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

A rákellenes Pt(II)-komplexek, mint például a ciszplatin vagy az oxaliplatin fő problémái, hogy nem szelektívek, így az egészséges sejteket is pusztítják. Egy fémkomplex szelektivitásának növelésére használhatók más ligandumok is. Ha nem csupán a fémion, de a ligandum is tumorelles hatású, akár többszörös hatású komplexek is nyerhetők. A kutatásom célja ilyen vegyületek előállítása volt. Az általam használt deferasirox és dekarboxi-deferasirox főként vas(III)-megkötő hatásuk révén, illetve reaktív gyökök generálásával gátolják a rákos sejtek működését. Fémionként a szintén rákellenes hatású ruténium(III)-, ozmium- és gallium(III)-ionokat használtam. Ugyancsak alkalmaztam kobalt(III)-iont is, mely komplexei hipoxia-aktívtak, vagyis az oxigénhiányos közegben a Co(III)-ionok szelektíven redukálódhatnak. A folyamat során Co(II) képződik és a komplex disszociál, ezzel felszabadítva a potenciálisan rákellenes hatású fémiont és a bioaktív ligandumokat.

Kutatómunkám során előállítottam a deferasirox új, jó vízdoldhatóságú szulfonált származékait, a diszulfó-deferasiroxot és a diszulfó-dekarboxi-deferasiroxot. Ezt követte a deferasiroxszal a Ru(III)-, Co(III)-, Os- és Ga(III)-komplexek szintézise. A Co(III) dekarboxi-deferasiroxszal alkotott komplexét is előállítottam. A kapott termékek pontos összetételét és tisztaságukat elemanalízises vizsgálatokkal, a termékek szerkezetének felderítését tömegspektrometriás, illetve NMR vizsgálatokkal ellenőriztem. A ^1H és COSY NMR eredmények a kialakuló biszkomplexek szerkezetét bizonyították.

A $\text{K}[\text{Ga(III)(deferasirox)}_2]$ ^{71}Ga NMR mérései alapján az adott körülmények között hidrolizált a komplex, így az oldatbeli speciáció meghatározása további vizsgálatokat igényelt, emiatt pH-potenciometriás méréseket is végeztem. A deferasirox modellvegyületeként a vízdoldható diszulfó-deferasiroxot alkalmaztam. A Ga(III) és diszulfó-deferasirox 1:1 és 1:2 molarányú rendszereinek oldategyensúlyi vizsgálatát végeztem el. Ennek során meghatároztuk a Ga(III)-komplexek összetételét és stabilitási állandóit. Eredményeink szerint fiziológiás pH-n a $[\text{Ga(III)(diszulfó-deferasirox)}_2]$ komplex a domináns forma a millimól koncentráció tartományban.

A kutatás folytatásaként az előállított komplexek biológiai vizsgálatát tervezzük. Érdekesnek tartjuk annak felderítését is, hogy vajon képes-e a Fe(III)-ion kiszorítani deferasirox-komplexeiből a fent említett fémionokat.

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőimnek Dr. Buglyó Péternek és Nagy Imrének, akik útmutatása és segítsége nélkül nem készülhetett volna el ez a dolgozat. Hálás köszönettel tartozok Dr. Földi-Bíró Lindának és Dr. Bényei Attilának a mérések során nyújtott segítségükért.

KISMENNYISÉGŰ FEHÉRJEKEVERÉKEK FOSZFORILÁCIÓJÁNAK VIZSGÁLATÁRA ALKALMAS DÚSÍTÁSI MÓDSZEREK FEJLESZTÉSE

**Bugyi Fanni^{a,b}, Tóth Gábor^a, Sugár Simon^a, Goran Mitulović^c, Vékey Károly^a, Turiák Lilla^a,
Drahos László^a**

^a*Természettudományi Kutatóközpont, MS Proteomika Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt 2.*

^b*ELTE, TTK, Kémiai Intézet, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.*

^c*Proteomics Core Facility, Medical University of Vienna, 1090 Bécs, Ausztria*

A fehérjék foszforilációja egy rendkívül széleskörű biológiai szereppel rendelkező poszt-transzlációs módosítás, vizsgálatára jól alkalmazható technika az enzimatisz emésztést követő tömegspektrometriás analízis. Kiemelten kis mennyiségű komplex fehérjekeverékek esetén elengedhetetlen a célkomponensek részhányadának növelése a mintában, így célul tűztük ki ezen vizsgálatokhoz a foszfopeptid dúsítását szolgáló minta-előkészítési módszerek fejlesztését, optimalását és átfogó összehasonlítását.

Két különböző állófázis, valamint öt mintafelviteli pufferkeverék alkalmazhatóságát vizsgáltuk szilárd fázisú extrakciós (SPE) dúsítási elrendezésben. Modellként a HeLa méhnyakrákos sejtvonal lizátumának triptikus emésztményét választottuk.

A vizsgált módszerek szelektivitása és hatékonysága nagymértékben eltérőnek bizonyult, azonban kiemelkedő hatékonyságot, 250 ng HeLa sejtlizátum dúsítása esetén, két módszerrel értünk el: a pipettahegy alapú TiO₂ állófázist és az 50 mM citromsavat tartalmazó felvitelipuffert kombináló módszerrel 192 db foszfopeptid azonosítható 35-szörös dúsítási faktorról, míg a TiO₂ funkcionális monolit kolonna állófázist és a 20% ecetsavat tartalmazó felvitelipuffert kombináló módszerrel 202 db foszfopeptid 9-szeres dúsítási faktorról. Megállapítottuk, hogy a két módszer eltérő szelektivitással bír, az összes azonosított foszfopeptid mindössze 43%-a azonosítható mindkét minta-előkészítési módszerrel. Az első módszert alapul véve, a felviteli pufferek finomhangolásával, két további módszert fejlesztettünk, melyek alkalmazásával lecsökkentettük a nem-foszforilált peptid állófázishoz történő kötődését, megnövelve ezáltal a dúsítás hatékonyságát (a dúsítási faktort).

Összességében elmondható, hogy több általunk fejlesztett, eltérő szelektivitású módszer is alkalmas kiemelten kis mennyiségű fehérjekeverékek foszfopeptidjeinek szelektív dúsítására. A módszerek teljes proteomikai munkafolyamatba történő integrálása és szöveti biopsziákon való alkalmazhatóságának tesztelése jelenleg is zajlik.

A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatásával valósult meg (2018-1.2.1-NKP-2018-00005).

TUNING PARTICLE STABILITY IN AQUEOUS SOLUTIONS OF IONIC LIQUIDS

Dóra Takács, Bojana Katana, István Szilágyi

MTA-SZTE Lendület Biocolloids Research Group, University of Szeged, H-6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Particle dispersions are widely used systems in various applications in industrial or biomedical processes. In these applications, the ions of dissolved salts and of the solvent have great importance, since they are able to interact specifically with surfaces, thereby modifying the charge density in different extents due to their distinct adsorption affinities. This significantly influences the colloidal stability of the samples. Such phenomena prompted the establishment of the Hofmeister series of cations and anions to order their effect on particle aggregation processes [1]. Hofmeister series refer specifically to the phenomenon that different ions of the same valence influence the measurable properties of a given system. Ionic liquids (ILs), as solvents, are of particular interest from this aspect, since they are composed entirely of ions, unlike the conventional solvents [2]. Therefore, the interfacial assembly of the IL constituents greatly affects the interparticle forces and hence, the stability of colloidal dispersions. This issue can be adequately addressed in diluted IL solutions by investigating the effect of the interfacial properties on the interparticle forces.

Therefore, in the present research, the surface charges and colloidal stability of polymer-based particles were investigated in the presence of aqueous IL solutions containing chloride, bromide, nitrate or acetate anions and the 1-butyl-3-methylimidazolium (BMIM⁺) cation. Two types of positively charged particles were studied, namely, polystyrene-based amidine latex (AL) and SL-IP-2 consisting of a sulfate latex (SL) functionalized with an imidazolium-based polymer (IP-2). In this way, ion specificity was explored with polymeric particles of the same sign of charge, but with different surface functionalities. The charging and aggregation processes were studied in electrophoretic and dynamic light scattering measurements. In addition to the qualitative results, we quantified the extent of possible adsorption of the components and its effect on the aggregation constant of the particles. The experimental results were compared and interpreted with DLVO theory and the Hofmeister series. The main novelty of the results is that the ion specific effects, which play a major role in the stability of AL particles, were masked by functionalization of the polystyrene surfaces with the IP-2 polymer.

[1] W. Kunz, J. Henle, B. W. Ninham; *Current Opinion in Colloid & Interface Science* **2004** (9) 19-37.

[2] R. Hayes, G. G. Warr, R. Atkin; *Chemical Reviews* **2015** (115) 6357-6426.

Acknowledgement: This research was financially supported by the ELTE Márton Áron Special College



MOLEKULÁRIS KÖLCSÖNHATÁSOK JELLEMZÉSE FONDAPARINUX- CIKLODEXTRIN RENDSZEREKBEN

Várnai Bianka, Béni Szabolcs

Semmelweis Egyetem Farmakognóziai Intézet, Budapest 1085 Üllői út 26.

A heparin máig a leggyakrabban alkalmazott indirekt antikoaguláns, szerkezetét tekintve nagymértékben szulfatált, lineáris poliszacharid-láncok polidiszperz keveréke. Napjainkban a frakcionálatlan heparin alkalmazását egyre inkább kiváltják a biztonságosabb, kis mólsúlyú heparinok (LMWH), illetve az antitrombin-kötődésért felelős pentaszacharid szekvencia szintetikus analógjai, így a fondaparinux (FDPX). A heparin hatásának antagonizálására a gyógyászatban a bázikus karakterű, polikationos protamint alkalmazzák, mely azonban a LMWH-k és a szintetikus pentaszacharidok antikoaguláns hatását nem, vagy csak igen kis mértékben képes felfüggeszteni. Mindezeket figyelembe véve, új szerkezetű, potenciális heparin antidótumok keresése kiemelt fontosságú.

Munkánk során célul tűztük ki kationos ciklodextrinek (CDk), mint potenciális heparin antidótumok és az anionos FDPX között kialakuló molekuláris kölcsönhatások jellemzését NMR spektroszkópia segítségével. ^1H NMR előkísérletek alapján a heptakis(6-dezoxi-6-amino)- β CD mutatkozott a legígéretesebbnek, így a bázikus karakterű, polikationos CD és a FDPX kölcsönhatását vizsgáltuk két különböző pH értéken (7,4 és 2,0). Az ^1H NMR spektrumok Job módszer szerinti kiértékelésével meghatároztuk a „komplex” sztöchiometriáját mely pH 7,4 esetén 1:1, míg a pH 2,0 értéken vegyes összetételt mutatott. A látszólagos stabilitási állandókat az ^1H NMR titrálási adatokból nemlineáris görbeillesztéssel határoztuk meg, a pH* 2,0 oldatok esetén tapasztalt igen nagy stabilitási állandó ($\log K > 5$) alapján nagy affinitású komplex kialakulása feltételezhető az egyensúlyi oldatban. A komplex szerkezetének pontosabb jellemzésére 2D ROESY NMR technikát alkalmaztunk.

A pH 2,0 oldatokban az FDPX degradációját tapasztaltuk, mely a polikationos CD jelenlétében nagymértékben visszaszorult, köszönhetően a két molekula között kialakuló erős intermolekuláris kölcsönhatásnak. Különböző időpontban mért NMR spektrumok segítségével elvégeztük a FDPX és bomlástermékének teljes ^1H NMR jel hozzárendelését, melynek segítségével megállapítottuk, hogy a savas közegben történő átalakulás az iduronsavat és a triszulfatált glükózamin egységeket érintő szulfátvesztés.

Eddigi eredményeink alapján megállapítható, hogy a per-6-amino- β CD alkalmas lehet a FDPX stabilizálására, valamint a jelentős intermolekuláris kölcsönhatásnak köszönhetően jó kiindulása lehet újabb heparin antidótumok fejlesztésének is.

Köszönet illeti Dr. Szakács Zoltánt (Richter Gedeon Nyrt.) az ^1H NMR titrálások kiértékeléséhez nyújtott segítségével, illetve a Cyclolab Kft munkatársait a rendelkezésünkre bocsátott ciklodextrin-származékokért.

A TERMODINAMIKAI PARAMÉTEREK MEGHATÁROZÁSÁNAK BIZONYTALANSÁGA NAGYHATÉKONYSÁGÚ FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁBAN

Szerencsés Dénes, Berkicsné Sepsey Annamária, Felinger Attila

Pécsi Tudományegyetem, Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék, 7624 Pécs, Ifjúság útja 6.

A királis kromatográfiában az enantiomerek elválasztásánál gyakori, hogy egyetlen vegyület retenciós tényezőjének hőmérsékletfüggéséből termodinamikai paramétereket számolnak az ún. van't Hoff ábrázolással ($\ln k$ vs. $1/T$) [1]. Azonban a retenciós tényező (k) értéke még fordított fázisú kromatográfiában sem csupán egyetlen típusú kötőhellyel kialakított kölcsönhatásokból adódik [2], és kiváltképp nem igaz ez királis kromatográfia esetében, ahol az állófázison többféle típusú kötőhely található. Mivel ezek elkülönítése kísérleti úton nem lehetséges, a környezet modellezése céljából két különböző típusú fordított fázisú kromatográfiás állófázist alkalmaztam. Az egyes kötőhelyek megismeréséhez először egyénileg határoztam meg azok termodinamikai paramétereit (standard moláris entalpia és entrópia értékeit), majd egy kapilláris segítségével összekötöttem őket, hogy egy olyan rendszert kapjak, mely immár két ismert kötőhellyel rendelkezik és így is elvégeztem az elemzést.

Munkám során vizsgáltam, hogy a folyadékkromatográfiás körülmények változtatása, így az alkalmazott térfogatáram, a készülék típusa és az oszlophossz milyen hatással van a kapott termodinamikai paraméterekre mind az egyedi, mind az összekötött oszlopok esetén. Eredményeim azt mutatták, hogy a készülék típusa fontos tényező a kapott eredmények szempontjából. Hasonló kijelentések tehetők az oszlophosszra is, azonban nulla átlagnyomásra való extrapolálással csökkenthető a számított termodinamikai adatok eltérése. Igazoltam, hogy az egyes megkötődések termodinamikai adatainak lineáris kombinációjával nem kaphatók meg az összekötött oszlop hasonló paraméterei. Kutatómunkám során továbbá az Eyring-egyenletet vizsgáltam, amely egy másik lehetséges módszer a termodinamikai paraméterek számítására. A mérések elsősorban fordított fázisú elválasztásokra irányultak, azonban a levont következtetések általánosak, más elválasztási mechanizmusokra is igazak lehetnek.

[1] L. D. Asnin, M. V. Stepanova; *Journal of separation science*, **2018** (41) 1319-1337.

[2] F. Gritti, G. Guiochon; *Analytical Chemistry*, **2006** (78) 4642-4653.

SZERVES KÉMIAI SZEKCIÓ I.

ÚJ FLUORESZCENS β -KARBOLIN-SZÁRMAZÉKOK

Szepesi Kovács Dénes^{a,b}, Hajdu Imre^{a,b}, Szabó Tímea^c, Szilágyi Bence^a, Milen Mátyás^c, Keserű György Miklós^{a,b}, Ábrányi-Balogh Péter^{a,b}

^aTermészettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok körúta 2.

^bBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8. F. II. magASFöldszint

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

Számos, széles körben elterjedt fluoreszcens jelölőanyag ismert a szakirodalomban, ezeknek egy jelentős csoportja a difluorboranil-csoportot tartalmazó vegyületek. A difluorboranil-csoportot jellemzően vagy két nitrogén közé építik be, ilyenek a BODIPY származékok [1], amelynek analógiájára fluoreszcens, triptamin vázrészletet tartalmazó melatonin receptorra szelektív jelölővegyületet is szintetizáltak [2]. Ezen kívül nitrogén és oxigén koordinálta difluorboranil komplexek is ismertek, amelyekre példa a boroizokinolin vegyületcsalád [3].

Kutatómunkám során célul tűztük ki új fluoreszcens alkaloidszármazékokat előállítását difluorboranil-csoport beépítésével. Emellett vizsgálni kívánjuk az egyes szubsztituensek optikai spektroszkópiára gyakorolt hatását.

Ehhez előbb több lépésben szintetizáltam a β -karbolin vázvegyületeket, majd difluorboranil csoporttal láttam el azokat. Az így előállított módosulatokat fotospektroszkópiai jellemzőit is meghatároztam. A jellemző hullámhosszadatok mellett (abszorbancia, gerjesztési és emissziós hullámhossz maximum), a moláris abszorpciós koefficiens és kvantumhasznosítási tényezőket is meghatároztam, illetve vizsgáltam a vegyületek fotostabilitását is. Egy származékból lizin jelölésére alkalmas festéket állítottunk elő, amellyel elvégeztük a fehérjejelölést és a fluoreszcens mikroszkópos képalkotást.

[1] A. Loudet, K. Burgess; *Chemical Reviews* **2007** (107) 4891–4932.

[2] J. Marteaux, P. Delagrange, F. Lefoulon, L. Dufourny; *ACS Medicinal Chemistry Letters* **2014** (5) 158–161.

[3] D. Sóvári, A. Kormos, O. Demeter, A. Dancsó, G. M. Keserű, M. Milen, P. Ábrányi-Balogh; *RSC Advances* **2018** (8) 38598–38605.

Köszönjük a kutatómunka támogatását az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3-I-BME-408 pályázatának és a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak (PD124598).

ÚJ α -HIDROXI-ETILÉNBISZFOSZFONÁT-SZÁRMAZÉKOK ELŐÁLLÍTÁSA Al_2O_3 FELÜLETÉN

Varga Petra Regina, Keglevich György

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1521 Budapest

Az α -hidroxifoszfónátok és származékaik jelentősége biológiai aktivitásukban rejlik [1]. Ezeket a vegyületeket elsősorban enzim-inhibítorként tartják számon. Az α -hidroxifoszfónátok szintézisére a legáltalánosabb módszer a Pudovik-reakció, amikor is a dialkil-foszfít addicionálódik az oxovegyületre. Az irodalomban számos példát találunk α -hidroxifoszfónátok előállítására, mely eljárások többsége katalizátorok és oldószerek alkalmazásával a környezetet terheli. Kutatócsoportunkban széles körben tanulmányozták különböző α -hidroxifoszfónát-származékok előállítását környezetbarát módon, mikrohullámú körülmények között és minimális oldószer felhasználásával [2-3]. Munkánk során kísérletet tettünk különböző α -hidroxi-etilénbiszfoszfónát-származékok előállítására alumínium-oxid [4] felületén. Modellvegyületként a csökkent reaktivitású dietil (2-oxopropil)foszfónátot választottuk, amit öt különböző dialkil-foszfittal, valamint difenilfoszfin-oxiddal reagáltattunk. Optimalizáltuk a szilárd fázisban megvalósított karbonilcsoportra történő addíciót. Arra az eredményre jutottunk, hogy savas felületű Al_2O_3 és megfelelő mennyiségű kálium-fluorid felületén lehet hatékonyan előállítani a kívánt α -hidroxi-etilénbiszfoszfónátokat. A termékeket ^{31}P NMR spektroszkópiás adatokkal (eltolódokkal és J_{pp} csatolásokkal) is jellemeztük.

[1] Rádai, Z.; Keglevich, G. Synthesis and reactions of α -hydroxyphosphonates. *Molecules* **2018**, 23, 1493.

[2] Keglevich, G.; Tóth, V.R.; Drahos, L. Microwave-assisted synthesis of α -hydroxybenzylphosphonates and -benzylphosphine oxides. *Heteroatom Chem.* **2011**, 22, 15.

[3] Rádai, Z.; Szeles, P.; Kiss, N.Z.; Hegedűs, L.; Windt, T.; Nagy, V.; Keglevich, G. Green synthesis and cytotoxic activity of dibenzyl α -hydroxyphosphonates and α -hydroxyphosphonic acids. *Heteroatom Chem.* **2018**, 29, e21436.

[4] Texier-Boullet, F; Foucaud, A. Synthesis of 1-hydroxyalkanephosphonic esters on alumina. *Synthesis-Stuttgart*, **1982**, (11), 916-916.

Köszönjük az OTKA K119202 pályázat anyagi támogatását!

KÜLÖNFÉLE α -HIDROXIFOSZFONÁTOK ÉS ANALOGONOK SAVAS HIDROLÍZISÉNEK VIZSGÁLATA

Harsági Nikoletta, Rádai Zita, Kiss Nóra Zsuzsa, Keglevich György

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1521, Budapest, Magyarország

A különböző *P*-észterek hidrolízise biológiai jelentősége ellenére még máig rejteget ismeretlen területeket a szintetikus vegyészek számára. A kapcsolódó publikációk többségében nem közölnek konkrét recepteket, gyakran több órán keresztül tömény savban történő forralással állították elő a kívánt *P*-savat [1]. Ezen túlzó körülmények elkerülése jelentette kutatásom alapját, célul tűztük ki a gyűrűs α -hidroxifoszfónátok és analogonok hidrolízisének alaposabb felderítését.

Az α -hidroxifoszfónátok és a belőlük előállítható savak bioaktivitásuk szempontjából fontos vegyületek, képviselőik enzim inhibitorokként [2], antibakteriális- és gombaölőszerekként [3] ismertek, illetve a növényvédőszer iparban is jelentős szerepük van [4]. Az irodalomban már számos reakciótípusukat vizsgálták, mi ezt kibővítve a hidrolízisükre is hangsúlyt fektettünk.

A hidrolíziseket a korábban általunk gyűrűs foszfinátokra optimalizált körülmények között hajtottuk végre [5]. Kísérleteink során kíváncsiak voltunk az észterfunkció minőségének és a fenilgyűrűn lévő szubsztituenseknek hidrolízisre gyakorolt hatására, így modellvegyületeink között a fenilgyűrűn elektronküldő és -szívó szubsztituenseket tartalmazó metil- és etilészterek szerepeltek. A reakcióképesség felderítése céljából meghatároztuk a két lépés pszeudo-elsőrendű sebességi állandóinak értékét. Kíváncsiak voltunk továbbá arra, hogy ha az α -pozícióban hidroxilcsoport helyett proton, vagy metilcsoport található, illetve ha növeljük a szénatomok számát a foszforatom és a gyűrű között, ezek milyen hatással lesznek a reakció lejárására.

[1] Kolodyazhnaya, A. O., Kukhar, V. P., and Kolodyazhnyi, O. I., *Russian Journal of General Chemistry*, **2008** (78), 2043–2051.

[2] W. Lorenz, A. Henglein, G. Schrader, *Journal of American Chemical Society* **1955** (77) 2554-2556.

[3] G. S. Reddy, C. Syama Sundar, S. S. Prasad, E. Dadapeer, C. N. Raju, C. S. Reddy, *Der Pharma Chemica* **2012** (4) 2208–2213.

[4] G. Forlani, A. Occhipinti, Ł. Berlicki, G. Dziedziola, A. Wieczorek, P. J. Kafarski, *Journal of Agricultural and Food Chemistry* **2008** (56) 3193–3199.

[5] G. Keglevich, Z. Rádai, N. Harsági, Á. Szigetvári, N. Z. Kiss, *Heteroatom Chemistry*, **2017** (28) 21394.

Köszönjük az anyagi támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs hivatalnak (K119202).

TIOLOK ÉS SZÁRMAZÉKAIK ELŐÁLLÍTÁSA ELEMI KÉNNEL ELEKTRONHIÁNYOS KETTŐS KÖTÉST TARTALMAZÓ VEGYÜLETEKBŐL

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

^a*Természettudományi Kutatóközpont, Gyógyszerkémiai Kutatócsoport,
1117 Budapest Magyar Tudósok körútja 2.*

^b*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, 1111 Budapest
Műegyetem rakpart 3.*

A multikomponensű reakciók fontos részét képezik a modern szerves szintetikus kémia eszköztárának. Segítségükkel környezetbarát, atomhatékony és biztonságos módon, akár egy preparatív lépésben állíthatók elő komplex szerkezetek. Hatékonyságukat a reagensek megfelelő kiválasztásával fokozhatjuk. A természetben nagy mennyiségben előforduló, nem toxikus és könnyen kezelhető elemi kén alkalmazása segít kiváltani veszélyes, mérgező reagenseket, illetve tovább fokozni a reakciók atomhatékonyását [1-5].

Munkám során kidolgoztam egy új réz-katalizált vizes közegű pszeudo-multikomponensű reakciót elektronhiányos kettős kötést tartalmazó vegyületekből és elemi kénből kiindulva poliszulfán intermediereken keresztül tiolok előállítására. A multikomponensű reakcióban kapott poliszulfánokat *egy-üst* reakcióban alakítottam tiolokká, amelyekből további *egy-üst* eljárásban szubsztitúciós, addíciós és oxidációs reakciókban széles szerkezeti diverzitású kéntartalmú származékokat állítottam elő.

A témában a kutatócsoport tervei között szerepel az eljárás alkalmazása további elektronhiányos telítetlenséget tartalmazó vegyületekre, illetve a módszer alkalmazhatóságának vizsgálata tiolok változatos szerkezetű *egy-üst* reakcióira.

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

[2] Nguyen, T. B., *Adv. Synth. Catal.*, **2017** (359) 1066–1130.

[3] Dömling, A., Wang, W., Wang, K., *Chem. Rev.*, **2012** (112) 3083–3135.

[4] Nguyen, T. B., *Adv. Synth. Catal.*, **2020** (362) 3448–3484.

[5] Liu, S., Deng, G.-J., Huang, H., *Synlett*, **2020** (31) A–Q.

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőimnek a rengeteg hasznos tanácsért, illetve segítségért, melyet számomra nyújtottak. A kutatás az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-1-I kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának Támogatásával készült.

ÚJ KOVALENS IMMUNOPROTEASZÓMA INHIBITOROK AZONOSÍTÁSA

Kollár Levente^a, Szilágyi Bence^a, Ábrányi-Balogh Péter^a, Matic Proj^b, Damijan Knez^b, Ferenczy György^a, Martina Gobec^b, Stanislav Gobec^b, Izidor Sosič^b, Keserű György Miklós^a

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

^b Ljubljana Egyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, SI-1000 Ljubljana, Aškerčeva cesta 7.

A proteaszómák fontos szerepet játszanak a fehérje homeosztázis fenntartásában, és gátlásuk előnyösnek mutatkozott bizonyos onkológiai és autoimmun betegségek esetén. Az egészséges sejtekben megvalósuló proteaszóma gátlás ugyanakkor nemkívánatos mellékhatásokhoz vezethet, ezért számos kutatás célul tűzte ki specifikus immunoproteaszóma inhibitorok azonosítását. Szlovén partnereivel együttműködésben a közelmúltban csoportunk is bekapcsolódott e kutatásokba.

Fragmens szűrés eredményeképp azonosítottunk három rokon vegyületcsaládot, amelyek az immunoproteaszóma β 5i-alegységén kötődő, nagy ligandumhatékonyságú inhibitoroknak bizonyultak. A fragmens alapú gyógyszerkutatás stratégiáját követve ezeket a benz[d]oxazol-2(3H)-tion-, benz[d]imidazol-2(3H)-tion- és benz[d]tiazol-2(3H)-tion-vázis vegyületcsaládokat (együttesen: benz-X-azolok) elsőként az alapvázak klórral egyszeresen szubsztituált származékaiként vizsgáltuk („Chloro-Scan”). Tekintettel arra, hogy a leghatékonyabb gátlást a 6-os, valamint 7-es pozícióban szubsztituált analógok mutatták, a továbbiakban számos ilyen származékot állítottunk elő és vetettük alá biokémiai tesztelésnek.

Összehasonlítottuk továbbá a benz[d]imidazol-2(3H)-tion-vegyületek és N-metilezett analógjaik aktivitását. Utóbbiak jellemzően jóval hatásosabbak voltak, így számos N-metil-benz[d]imidazol-2(3H)-tion származékot szintetizáltunk és teszteltünk. Előállítottunk továbbá egy újabb szériát, melyben a 6-klórbenz[d]imidazol-2(3H)-tion alapváz a N-atomon jellemzően kisméretű, poláris szubsztituenseket hordoz.

A benz-X-azol vegyületcsalád beható vizsgálatakor több eredmény is afelé mutatott, hogy a gátlóhatásért a β 5i-alegység cisztein-oldalláncával (Cys48) kialakított diszulfid-híd a felelős. Ennek alaposabb tanulmányozására rokon vegyületek aktivitását is vizsgáltuk, melyek nem a korábban egységesen jelenlévő tion molekularészletet tartalmazzák, hanem helyette egyéb szerkezeti elemek (nitril, akrilamid, szulfonil-fluorid, stb.) szolgálnak „warhead”-ként.

A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (SNN_17125496), a Szlovén Kutatási Hivatal (N1-0068, J3-1745, and P1-0208) és a Richter Gedeon Talentum Alapítvány támogatásával valósult meg.

CH-SAVAS VEGYÜLETEK ACILEZÉSE

Gulyás Kinga Virág, †Grün Alajos, Keglevich György

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

A BME Szerves Kémia és Technológia tanszék Környezetbarát és Foszforkémiai Kutatócsoportjában különböző CH-savas vegyületek mikrohullámmal segített alkilezési reakcióit K_2CO_3 , illetve Cs_2CO_3 bázisok jelenlétében korábban már tanulmányozták, és a témában sikeres eljárásokat dolgoztak ki. A reakciókat fázistranszfer-, illetve oldószermentes körülmények között valósították meg, ami zöldkémiai szempontból nagy előrelépést jelentett [1]. Következő lépésként így a CH-savas vegyületek acilezési lehetőségeinek vizsgálatát tűztük ki célul. Munkánk során acetecetészter, dietil-malonát, illetve dietil-etoxikarbonil-metilfoszfónát acilezési lehetőségeit vizsgáltuk. Acilezőszerként benzoil-kloridot, acetyl-kloridot, és dietil-foszforil-kloridot használtunk.

Acetecetészter benzoil-kloriddal történő acilezése során az egyszerűen C-acilezett terméket fázistranszfer körülmények között szilárd-folyadék rendszerben kálium-karbonát, illetve cézium-karbonát bázis alkalmazásával is megkaptuk. Kálium-karbonát alkalmazásával is megvalósítható az acilezési reakció, azonban cézium-karbonát jelenlétében az egyszerűen acilezett termék mennyisége a duplájára nőtt, a reakcióidő pedig 1 napra rövidült. Dietil-malonát esetében váratlan termékként az enol-észter származék keletkezett. Mivel tulajdonképpen két benzoilcsoport épült be a molekulába, a legmagasabb konverziót kétszeres mennyiségű benzoil-klorid acilezőszer, Cs_2CO_3 bázis, illetve CITEBA katalizátor alkalmazásával értük el.

Acetecetészter dietil-foszforil-kloriddal végzett reakcióiban, fázistranszfer körülmények között, szilárd-folyadék rendszerben, K_2CO_3 , illetve Cs_2CO_3 bázisok alkalmazásával O-foszforilezett enol-származék keletkezett. Az enol alak (E) izomerjének szelektív (99%) előállítására sikerült egy 3 óra alatt, szobahőmérsékleten lejátszódó eljárást kidolgozni, melyben oldószerként acetont, bázisként Cs_2CO_3 -ot, katalizátorként pedig 10% CITEBA-t alkalmaztunk. Dietil-malonát dietil-foszforil-kloriddal való reakciójában Cs_2CO_3 bázis és CITEBA katalizátor jelenlétében váratlan O-etilezés történt.

Dietil-etoxikarbonil-metilfoszfónát acilezési reakcióinak optimalizálása jelenleg is zajlik. Az acilezési reakciókat NaH bázis jelenlétében, dietil-éter oldószerben, 1 napos reakcióidővel valósítottuk meg. Benzoil-kloriddal elvégzett reakciók során a mono- és - meglepetésre - diacilezett származékok keletkezését tapasztaltuk, acetyl-klorid alkalmazásakor a termék az egyszerűen acilezett származék volt.

[1] A. Grün, E. Bálint, G. Keglevich; *Catalysts*, **2015** (5) 634-652.

Köszönjük a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (OTKA K119202) támogatását.

SZEKUNDER FOSZFIN-OXIDOK ÉS *H*-FOSZFINÁTOK REZOLVÁLÁSA ÉS ÁTALAKÍTÁSI LEHETŐSÉGEIK

Varga Bence^a, Szemesi Péter^{a,b}, Buna Levente^a, Fogassy Elemér^a, Keglevich György^a, Bagi Péter^a

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

^bRichter Gedeon NyRT., 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.

A szekunder foszfin-oxidok és a *H*-foszfinátok kiemelt jelentőséggel bírnak a foszforvegyületek körében, ugyanis stabil *P*-sztereogén centrumot tartalmazó intermediereknek tekinthetők, amelyekből sztereospecifikus reakciókban optikailag aktív tercier foszfin-oxidok, foszfin-boránok majd foszfinok állíthatók elő.[1] Azonban az irodalomban eddig kevés sztereoselektív szintézist vagy rezolválást publikáltak P(O)H funkciós csoportot tartalmazó vegyületekre. Ezen vegyületek másik jelentőségét az adja, hogy *P*-királis savakká alakíthatók, amelyek NMR-shift reagensként és organokatalizátorként is alkalmazhatók.[2]

Munkám során célul tűztük ki, hogy preparatív rezolválási eljárást dolgozzunk ki szekunder foszfin-oxidokra és *H*-foszfinátokra.[3] Először a modellvegyületek [Ph(2-MeC₆H₄)P(O)H és Ph(AdO)P(O)H] rezolválásának eredményességét befolyásoló fő paramétereket vizsgáltuk és optimalizáltuk. Ezt követően az eljárást sikeresen terjesztettük ki, számos különböző származékra, mindkét vegyület család esetén, és vizsgáltuk a szubsztituensek hatását az enantiomer elválasztás eredményességére. Továbbá a szekunder foszfin-oxidok sztereospecifikus átalakításával optikailag aktív tercier foszfin-oxidokat állítottunk elő. Az adamantil-fenil-*H*-foszfinát esetében a megfelelő optikailag aktív tiofoszfonsav előállítását is vizsgáltuk. Végül előkísérleteket végeztünk az előállított adamantil-feniltiofoszfonsav felhasználására.

[1] S. Lemouzy, L. Giordano, D. Hérault, G. Buono, *European Journal of Organic Chemistry*, **2020**, 3351-3366

[2] K. Kuwabara, Y. Maekawa, T. Murai, *Tetrahedron*, **2020**, 76, 131152-131166.

[3] B. Varga, R. Herbay, G. Székely, T. Holczbauer, J. Madarász, B. Mátravölgyi, E. Fogassy, G. Keglevich, P. Bagi, *European Journal of Organic Chemistry*, **2020**, 1840-1852.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült (ÚNKP-20-3-II-BME-282).

FLUORTARTALMÚ ÉPÍTŐELEMÉK SZINTÉZISE METATÉZIS REAKCIÓK ALKALMAZÁSÁVAL

Benke Zsanett Amália, Kiss Loránd

SZTE GYTK, Gyógyszerkémiai Intézet, 6720 Szeged, Eötvös u. 6.

Korábban a természetes molekulák voltak vezető forrásai a gyógyszerkutatásnak, az elmúlt évtizedben szemléletváltás következett be azáltal, hogy különösen nagy figyelmet szentelnek a molekulakönyvtárak szerkezeti, ezáltal a funkcionális diverzitására, szemben a molekulaméret növeléssel. A diverzitás-orientált szintézis egy hatékony módszer ilyen szerkezeti és sztereokémiai diverzitással rendelkező molekulakönyvtárak kialakítására. [1] A metatézis széles körben alkalmazott eljárás kémiai és sztereokémiai diverzitással rendelkező funkcionálizált molekulák szintézisére. [2] A funkcionálizált izoxazolinváz számos fontos biológiailag aktív molekula alkotórésze [3], ezen túlmenően szintetikus szempontból is igen fontos helyet foglalnak el a szerves kémiában. [4] A szerves fluortartalmú vegyületekre egyre nagyobb figyelem irányul biológiai tulajdonságaiknak köszönhetően a gyógyszerkémiaiában. [5]

Kutatómunkánk során izoxazolin gyűrűvel kondenzált vegyületeket állítottunk elő 2,5-norbornadiénből kiindulva. Az izoxazolingyűrűt nitril-oxidok 1,3-dipoláros cikloaddíciónál alakítottuk ki. Az így előállított heterociklusok C-C kettős kötését metatézis reakciókkal alakítottuk tovább. A metatézis reakciókat Ru-alapú katalizátorok jelenlétében végeztük, a keresztemetatézis reakciókban reagensként metil-vinil-ketont, metil-akrilátot, valamint különböző fluortartalmú terminális olefineket alkalmaztunk.

- [1] a) O' Connor, C. J., Beckmann, H. S. G., Spring, D. L. *Chem. Soc. Rev.* **2012** (41) 4444–4456.; b) W. R. J. D. Galloway, A. Isidor-Llobet, D. R. Spring *Nat. Commun.* **2010** (1) 1-13.
- [2] a) Zs. Benke, M. Nonn, M. Kardos, F. Fülöp, L. Kiss *ChemistrySelect* **2019** (4) 2886-2891.; b) M. Nonn, Zs. Benke, S. Fustero, F. Fülöp, L. Kiss *Eur. J. Org. Chem.* **2019** 5285-5293.; c) A. M. Remete, Zs. Benke, L. Kiss *FluorineNotes* **2019** (6) 1-28.
- [3] a) K. A. Kumar, M. Govindaraju, N. Renuka, G. V. Kumar, *J. Chem. Pharm Res.* **2015** (7) 250-257.; b) S. K. Prajapati, S. Shrivastava, U. Bihade, A. K. Gupta, V. G. M. Naidu, U. C. Banerjee, B. N. Babu *Med. Chem. Commun.* **2015** (6) 839-845.
- [4] R. Bartolotta, C. La Rosa, D. Nava, *Synthesis* **2020** (52) 933–941.
- [5] a) Y. Zhou, J. Wang, Z. Gu, S. Wang, W. Zhu, J. L. Aceña, V. A. Soloshonok, K. Izawa, H. Liu *Chem. Rev.* **2016** (116) 442-518.; b) H. Mei, A. M. Remete, Y. Zou, H. Moriwaki, S. Fustero, L. Kiss, V. A. Soloshonok, J. Han *Chin. Chem. Lett.* **2020** (31) 2401-2413.

ANYAGTUDOMÁNYI SZEKCIÓ

LAPCENTRÁLT KÖBÖS (FCC) ÉS SÚRÚ ILLESZKEDÉSŰ HEXAGONÁLIS (HCP) KRISTÁLYRÁCSÚ NI NANORÉSZECSEKÉK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS FELHASZNÁLÁSA

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

^aSZTE TTIK, Kémiai Intézet, Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport, 6720 Szeged, Aradi vértanúk tere 1

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

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

Manapság a katalitikus folyamatok végrehajtása során is előtérbe került a költséghatékonyság elve, amely, például, a gyakran használt Pd- és Pt-katalizátorok helyettesítésével kivitelezhető. Erre egy lehetséges megoldás lehet a Ni-katalizátorok alkalmazása [1].

Korábbi munkánk során fcc-Ni nanorészecskéket állítottunk elő hidrazinos redukcióval, és alkalmaztunk katalizátorként egy Suzuki-Miyaura keresztkapcsolási reakcióban. Az újrafelhasználás során a katalizátorok aktivitása jelentősen csökkent, mellyel párhuzamosan a szerkezetük is megváltozott.

Jelen munkánk során a katalizátor aktivitásának csökkenése és a szerkezet változása közötti összefüggéseket vizsgáltuk. A kísérletek első lépése egy oldószer kompatibilitási vizsgálat volt, amelyben a katalizátorok szerkezetét röntgendiffraktometriával (XRD) vizsgáltuk 24 órás forralás után. A mérési eredmények alapján a kiindulási fcc-Ni DMSO-ban NiS-dá alakult, míg DMF-ben és etanolban részleges szerkezeti átalakulást tapasztaltunk (fcc-hcp). Toluolban nem történt jelentős változás.

Ezek alapján a különböző szerkezetű katalizátorok katalitikus tulajdonságát a toluol katalitikus oxidációja során tanulmányoztuk. A reakciókörülmények optimalizálása (hőmérséklet, oxidálószer és katalizátormennyiség) után a katalizátorok (fcc-Ni, fcc+hcp-Ni és hcp-Ni) újrafelhasználhatóságát is megvizsgáltuk. A kísérleti eredmények alapján az fcc-Ni kezdetben benzil-alkohol szelektív, de nem robosztus, ezzel szemben a hcp-Ni benzoészav szelektív és robosztus katalizátorként viselkedett. Abban az esetben, ha mindkét szerkezet egyszerre van jelen, akkor a katalizátor benzil-alkohol szelektív és robosztus egyszerre, így ez bizonyult a legjobb katalizátornak.

[1] V.K. Soni, P.R. Sharma, G. Choudhary, S. Pandey, R. K. Sharma, *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, **2017** (5) 5351-5359.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-4 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

SZÉRUM ALBUMIN – HIALURONSAV ALAPÚ KOMPLEX HATÓANYAGHORDOZÓ RENDSZEREK

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

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

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

A poliszacharid-fehérje konjugátumok új dimenziót képviselhetnek a komplex hatóanyag hordozó struktúrák fejlesztésében. [1] Munkánk során a szérum albumin/hialuronsav (BSA/HyA) konjugátumokat egy lépéses, szabályozható töltésemlegesítési technikával állítottuk elő keresztkötő ágensek és szerves oldószerek alkalmazása nélkül. A BSA és a HyA makromolekulák közötti kölcsönhatás pH-függő kvantitatív jellemzését többek között felületi plazmon rezonancia spektroszkópiával, részecsketöltés-titrálással, reológiai mérésekkel, dinamikus fényszórás és zavarosság méréssel, transzmissziós elektronmikroszkóppal, termoanalitikai módszerekkel, valamint cirkuláris dikroizmus és Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiás technikákkal vizsgáltuk. Igazoltuk, hogy a pH és az alkalmazott BSA/HyA tömegarányok erősen befolyásolják a részleges töltéskompensációval előállított mag-héj szerkezetű nanohordozók méretét (kb. 200 – 210 nm) és stabilitását.

Az optimális összetételű BSA/HyA nanohordozók szerkezeti jellemzése mellett eltérő hidrofilitású vegyületek (ibuprofen és 2-pikolinsav) kapszulázását is elvégeztük. Megvizsgáltuk továbbá a vegyületekre vonatkozó kapszulázási hatékonyságot és a hatóanyag-hordozóból történő felszabadulásának mechanizmusát. Az eredményeket összehasonlítottuk a szakirodalomban található hasonló hatóanyagtartalmú hordozókkal. [2]

[1] M. Gaber, M.T. Mabrouk, M.S. Freag, S.K. Khiste, J.Y. Fang, K.A. Elkhodairy, *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, **2018** (133), 42-62.

[2] A. N. Kovács, N. Varga, Á. Juhász, E. Csapó, *Carbohydrate Polymers*, **2021** (közlésre elfogadva)

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

MECHANOKÉMIA A KATALÍZIS SZOLGÁLATÁBAN: PEROVSKIT SZERKEZETŰ ANYAGOK ÉS KEVERÉK FÉM-OXIDOK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS VIZSGÁLATA

Kozma Gábor^a, Lipták Kata^a, Csáki Bernadett^a, Tóth Krisztián^a, Kukovecz Ákos^a, Kónya Zoltán^{a,b}

^a SZTE, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^b MTA, Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, 6720, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Az ipari folyamatok mintegy 85 %-a valamilyen katalitikus eljárás alapján, melynek oka a termékhozam maximálása, a gyártási folyamatok felgyorsítása és nem utolsósorban a hulladékképződés megelőzése. Ennek köszönhetően a katalizátorok világpiaci forgalma mára túllépte a 25 milliárd dolláros évi forgalmat. Az ipar csillapíthatatlan katalizátor-éhségét a kutatók csak a folyamatos fejlesztések mellett képesek kielégíteni, így alapvető cél az olcsón és nagy mennyiségben gyártható ilyen jellegű anyagok előállítása.

A mechanokémiai azon eljárások közé tartozik, melynek során a kinetikai munkát különböző anyagok átalakítására fordítjuk. Ez többnyire a felépítő jellegű szintézismódszerek közé tartozik, melynek segítségével nanométeres tartományba eső részecskéket hozhatunk létre. A perovszkitek közös jellemzője a $\text{XII A}^{2+}\text{VI B}^{4+}\text{X}_{2-3}$ általános képlettel leírható szerkezet. Sokoldalúságukat annak köszönhetik, hogy a kristályrácsbarácsba számos elem beépíthető, így tulajdonságaik változtathatók. Alkalmazásuk nem csak az olcsóbb napelemekben merül ki, hanem szenzorként, sőt katalizátorként is használhatóak. Ehhez hasonlóan a fém-oxidok és keverékeik kiemelt szerepet töltenek be a katalizátorok között.

Kutatócsoportunk így fő feladatuként a mechanokémiai úton előállítható perovszkit szerkezetű anyagok és keverék fém-oxidok előállítását és vizsgálatát határozta meg. Célunk olyan általános szintézis módszer kidolgozása, ami alkalmas számos ilyen anyag nagy mennyiségű gyártására. Ehhez rendelkezésünkre áll egy nagy energiájú őrlése alkalmas bolygó golyós malom, valamint az eljárás követését nagyban elősegítő in-situ nyomás- és hőmérsékletmérő rendszer. A mért adatok mellett, a részben általunk kidolgozott és igazolt őrlési energia meghatározására alkalmas összefüggéssel, egy a szintézis körülményeit leíró modellt is felhasználtunk.

A munka a Magyar Tudományos Akadémia, BO/00835/19/7 számú Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával, valamint az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-5-SZTE-656 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.

AZ FEKETE FOSZFOR ISMÉTELT OXIDÁCIÓJÁNAK ÉS REDUKCIÓJÁNAK HATÁSA A SZERKEZETRE

Bartus Pravda Cora^a, Juan Gómez-Pérez^a, Kónya Zoltán^{a,b}, Kukovecz Ákos^a

^aSZTE IKK AKKT, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1, Magyarország

^bMTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1, Magyarország

A fekete foszfor (BP) termodinamikailag egy stabil allotróp a foszfor vegyületei közül. Hasonló 2D réteges szerkezettel rendelkezik, mint a grafit, rétegeit van der Waals kölcsönhatások tartják össze. Napjainkban széles körben használják kiváló elektromos és fizikai tulajdonságai miatt, többek között szenzorokban és FET típusú tranzistorokban. A BP félvezető tulajdonságokkal rendelkezik, tiltott sáv szélessége hangolható a rétegek számának változtatásával. Grafithez hasonlóan hámlasztásos módszerrel előállíthatók belőle 2D szerkezetű nanoanyagok. Egy vagy néhány réteg vastagságú nanoszerkezeteket többek között folyadék fázisú vagy mechanikus hámlasztás segítségével is előállíthatunk. A BP felülete nagyon érzékeny számos tényezőkre képesek felületi hibák előidézésére, mint például a víz és fény, ezen felül könnyen oxidálódik, akár a levegő oxigénjének hatására is.

Ezek a változások mind befolyásolhatják a BP előnyös tulajdonságait, emiatt munkánk során célul tűztük ki a redoxi tulajdonságainak tanulmányozását a fekete foszfor rutinszerű alkalmazásának megkönnyítése érdekében.

Kétféle oxidáció játszódhat le: felületi és belső oxidáció. Felületi oxidáció esetén, a felületen lévő O atomok nem oxidálják tovább az alatta levő rétegeket csak a külső rétegben van változás. A belső oxidációnál pedig a BP teljes szerkezetét érintő változás jön létre, amelyet nagyobb energia közléssel pl.: hőkezeléssel tudunk elérni, mert így az O atomok képesek a rétegek közé bejutni.

Munkám során folyadék fázisú hámlasztással állítottam elő nanolapokat, melyeknek stabilitását, oxidációját és redukcióját vizsgáltam Raman és UV-látható spektroszkópia segítségével. Raman mikroszkóp abban segített, hogy ugyan azokon a nanolapokon történő változásokat tudtam figyelemmel követni. Előadásomban bemutatom a felületi oxidációt és annak a szerkezetre gyakorolt hatását, valamint az oxidált BP redukciójának sikerességét, hidrazin hidrát redukálószer hozzáadásával. A felületi oxidáció kevesebb, mint 1 óra alatt játszódik le, és a kialakuló oxid réteg gátolja a további oxidáció létrejöttét. Az ismételt redukció sikerességét a fekete foszforra jellegzetes A_1g , B_{2g} , A_2g csúcsok visszarendeződésével igazoltuk, valamint a tiltott sáv változásával.

BÓR-NITRID NANORÉSZECSKÉK KOLLOID STABILIZÁLÁSA POLIELEKTROLITOKKAL

Vásárhelyi Livia^a, Hegedűs Tímea^a, Sáringer Szilárd^b, Szilágyi István^b, Kónya Zoltán^{a,c}

^aSzegedi Tudományegyetem, Interdiszciplináris Kiválósági Központ, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^bSzegedi Tudományegyetem, Interdiszciplináris Kiválósági Központ, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE „Lendület” Biokolloidok Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^cMTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

A bór neutron befogásán alapuló terápia (BNCT) egy ígéretes terület a rákkutatásban. Az eljárás azon alapul, hogy ha ^{10}B -et neutronokkal besugározzák, az elbomlik egy ^7Li magra és egy α részecskére. Az α részecske nagy energiájú, de kicsi a behatolási mélysége, ezért ha közvetlenül a tumorsejtekbe juttatjuk a bórt, akkor a besugárzás hatására azok elpusztulnak, az egészséges sejtek viszont sértetlenek maradnak. A jelenleg elterjedten használt bórforrások (nátrium-bórkaptát, bór-fenilalanin) aránylag kis mennyiségű bórt tartalmaznak, a bór-nitrid (BN) nanorészecskék ellenben 1:1 arányban tartalmaznak bór és nitrogén atomokat, így ígéretes jelöltek lehetnek BNCT terápiaiban való felhasználásra. Ahhoz, hogy nanorészecskéket a gyakorlatban is alkalmazni tudjunk terápiás célokra, fontos lépés ezek kolloid stabilizálása fiziológiás körülmények között, hogy a vérbe juttatva ne aggregálódjanak és eljussanak a tumoros sejtekhez.

Kutatásunk során kémiai gőzfázisú leválasztás technikával állítottunk elő viszonylag monodiszperz, gömb alakú hexagonális bór-nitrid nanorészecskéket. Az előállított részecskéket transzmissziós elektronmikroszkópiás, infravörös spektroszkópiás és röntgendiffraktometriás mérésekkel karakterizáltuk. A részecskék méretét és kolloidális stabilitását dinamikus fényszórás módszerrel vizsgáltuk. A nanorészecskék stabilizálására a felületüket három különböző polielektrolittal funkcionizáltuk és a polielektrolit koncentráció szisztematikus változtatásával meghatároztuk a részecskék felületének optimális borítottságához szükséges polielektrolit mennyiséget. Vizsgáltuk emellett az ionerősség hatását a polielektrolittal bevont részecskék stabilitására és felületi töltésállapotára.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-3-SZTE-574 kódszámú Új Nemzeti Kiválósági Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphól finanszírozott szakmai támogatásával készült.

3D POLISZUKCINIMID HÁLÓK LÉTREHOZÁSA ELEKTROSTATIKUS SZÁLKÉPZÉssel SZERVETLEN SÓK JELENLÉTÉBEN

Hummel Dávid^a, Juhász Ákos György^a, Jedlovsky-Hajdú Angéla^a

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

Az elektromos szálhúzás évtizedek óta az egyik legelterjedtebb módja a nano- és mikroszálas hálók létrehozásának. Az ilyen hálós rendszerek gyakorlati alkalmazása több területen is ígéretes, ezek közé tartozik például a szűrők készítése, hatóanyagok célba juttatása, sebfezés vagy szövetpótlás [1]. Ez utóbbi célra több szempontból alkalmasnak bizonyul a poliszukcinimidből (PSI) készített háló, amely biokompatibilis anyag, hiszen hidrolízissel poliaszparaginsavvá (PASP) alakul, amelyet a szervezet enzimei képesek lebontani [2].

Az elektromos szálhúzással létrehozott hálók jellemzően vékonyak, laposak, a szálak szorosan fekszenek egymáson. Egyes alkalmazásokhoz azonban hasznosabbnak bizonyulnak a háromdimenziós kiterjedéssel bíró hálók, például, ha extracelluláris mátrixhoz hasonló struktúrát akarunk létrehozni. A 3D szerkezettel tipikusan nagyobb szálak közötti pórusméret jár együtt, ami megkönnyíti a sejtek infiltrációját [1,3].

Kutatásunk célja olyan 3D szerkezetű elektrosztatikus szálhúzással előállított poliszukcinimid alapú struktúra kialakítása, mely különböző koncentrációjú szervetlen sókat tartalmaz (LiCl, CaCl₂, MgCl₂). A rendszerhez adott sók hatását a 3D szerkezet kialakulására többen is leírták már, de a pontos hatásmechanizmus még nem teljesen világos [4]. Kísérleteim során meghatároztam a 3D struktúrák létrehozásához legmegfelelőbb sókoncentrációkat, továbbá mértem az oldatok vezetőképességének és viszkozitásának változását a sókoncentrációk függvényében. Az esetleges só-polimer kölcsönhatás feltárására ATR FT-IR spektroszkópiát használtam.

- [1] A. Haider, S. Haider, I. Kang, *Arabian Journal of Chemistry*, **2018** (11) 1165-1188.
- [2] K. Molnar, D. Juriga, P. Nagy, K. Sinko, A. Jedlovsky-Hajdu, M. Zrinyi, *Polymer International*, **2014** 63(9) 1608-1615.
- [3] M. Yousefzadeh, M. Latifi, M. Amani-Tehran, W. Teo, S. Ramakrishna, *Journal of Engineered Fibers and Fabrics*, **2012** 7(2) 17-23.
- [4] A. Juhasz, K. Molnar, A. Idrissi, A. Jedlovsky-Hajdu, *Journal of Molecular Liquids*, **2020** 312.

FENILALANIN AMMÓNIA-LIÁZ IMMOBILIZÁLÁSA POLITEJSAV ALAPÚ NANOSZÁLAS RENDSZEREKBEN

Koplányi Gábor^a, Melitta Gedai^a, Poppe László^a, Sánta-Bell Evelin^a, Balogh-Weiser Diána^{a,b}

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

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

Az egyre szélesebb körben alkalmazott biokatalizátorok jelentős képviselői az enzimek, melyek rendkívül sokfélék a természetben, a rekombináns technikák és az irányított evolúció révén tovább növelhető a változatosságuk. Az enzimkatalízis során komoly limitációt okoz, hogy az enzimek nehezen nem választhatók el a reakcióelegyből, valamint rendkívül érzékenyek a környezeti paraméterekre. Ezekre a hátrányokra kínál megoldást az enzim rögzítése egy erre alkalmas hordozó rendszer segítségével. A sokféle szilárd hordozórendszer közül a nanoszálalás anyagok ígéretesnek bizonyulnak, mivel képesek az enzimek gyors és stabil csapdázására.

A kutatómunkánk során egy rekombináns fenilalanin ammónia-liáz (PAL), mint modell enzim rögzítését vizsgáltuk nanoszálalás hordozóban. A kísérletek során a hordozó alapanyagaként egy könnyen hozzáférhető, olcsó, biodegradábilis polimert, a politejsavat (PLA), választottuk. [1,2]. A PLA előnyös fizikai és kémiai tulajdonságai mellett fontos jellemzője, hogy elektrosztatikus szálképzéssel nanoszálalás hordozókat állíthatunk elő belőle. Célunk a rögzítési eljárás során alkalmazott szálképzési paraméterek optimalítása és a különböző enzimkoncentrációjú prekursor oldatokból készített PLA nanoszálalok enzimrögzítő kapacitásának szisztematikus vizsgálata volt. Továbbá összehasonlítottunk több, különböző hidrofíli-lipofíli egyensúlyi értékkel (HLB-érték) rendelkező emulgeálószer hatását a nanoszálalás hordozóba ágyazott PAL aktivitására. Az előállított enzimkészítmények morfológiáját pásztázó elektronmikroszkóppal, biokatalitikus aktivitását L-fenilalanin dezaminálási reakciójában vizsgáltuk.

[1] D. Balogh-Weiser, C. Németh, F. Ender, B. Gyarmati, A. Szilágyi, L. Poppe; *Electrospun Nanofibers for Entrapment of Biomolecules*, InTechOpen, **2018** (9), 135–47.

[2] P.L. Solti, D. Weiser, T. Vigh, Z.K. Nagy, L. Poppe, G. Marosi; *Bioprocess Biosyst. Eng.* **2016** (39), 449–459.

A kutatást az NKFIH PD-131467 pályázata támogatja.

ENGLISH SECTION

THE COLLOIDAL STABILITY AND ENZYMATIC ACTIVITY OF PRUSSIAN BLUE NANOPARTICLES IMMOBILIZED ONTO POLYSTYRENE LATEX PARTICLES

Nizar B. Alsharif^a, Gergely F. Samu^b, Istvan Szilagyi^{a,b}

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

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

Despite being remarkable catalysts, natural enzymes suffer from inherent sensitivity to their environment leading to a narrow window of operational conditions such as pH or temperature. In addition, enzyme production and purification can be expensive and time consuming [1]. Such drawbacks led to the development of low cost artificial enzymes that possess the catalytic potential or activity as natural ones such as catalase and peroxidase. Nanomaterials have been heavily explored as artificial enzymes due to their large surface area, high reactivity, and tunable physico-chemical properties [2]. Here, we report the horseradish peroxidase (HPR) and superoxide dismutase (SOD) activity of Prussian blue (PB) nanoparticles. To further enhance their colloidal stability, PB NPs were immobilized onto larger amidine-functionalized polystyrene latex (AL) particles by heteroaggregation. The negatively charged PB nanoparticles strongly adsorbed on the oppositely charged AL particles resulting in a range of AL-PB composites of positive, neutral and negative overall charge. The AL-PB composite of a saturated PB layer on the surface of the AL particles formed considerably stable dispersions. Further, the morphology, structural and functional features of the AL-PB composites were explored by electron microscopy and enzymatic assays. The results revealed that the immobilization of PB nanoparticles not only provided a sustained catalytic surface but did not compromise the enzyme-like activities. The obtained stable composite is a promising agent in antioxidant therapies and wherever the aim is to reduce oxidative stress at laboratory or larger scale.

[1] S.J. Benkovic, S. Hammes-Schiffer; *Science*, **2003** (301) 1196-1202.

[2] H. Wei, E.K. Wang; *Chem. Soc. Rev.*, **2013** (42) 6060-6093.

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

IMMOBILIZATION OF AN ANTIOXIDANT ENZYME CASCADE ON TITANIA NANOSHEETS

Szilárd Sáringer, István Szilágyi

MTA-SZTE Lendület Biocolloids Research Group, Department of Physical Chemistry and Materials Science, Faculty of Science and Informatics, University of Szeged, 1 Rerrich Béla tér, 6720 Szeged, Hungary

An antioxidant enzyme cascade was successfully immobilized on titania nanosheets (TNS) by the sequential adsorption method. The TNS was prepared by hydrothermal synthesis and it was functionalized by adsorbing positively charged poly-diallyldimethylammonium (PDADMAC) and negatively charged poly-styrenesulfonate (PSS) [1]. Superoxide dismutase (SOD) and Horseradish peroxidase (HRP) were immobilized among the polyelectrolyte layers to obtain the TNS-PDADMAC-SOD-PSS-HRP hybrid material. It was found that both the enzymes and the polyelectrolytes strongly adsorb on the oppositely charged surface through electrostatic forces[2]. The charging and aggregation properties was characterized by electrophoretic and light scattering techniques at different polyelectrolyte and enzyme doses. The formation of the polyelectrolyte multilayer on the TNS gave rise to highly stable colloids, i.e., remarkable resistance against salt induced aggregation. The polyelectrolyte and enzyme multilayers were built up in two different sequence (TNS-PDADMAC-SOD-PSS-HRP and TNS-HRP-PDADMAC-SOD-PSS). The enzymatic activity of different systems was determined for both enzymes. The results shed light on that the enzymatic activity depends on the location of the enzymes in the hybrid material. Although the obtained materials possessed somewhat lower enzymatic activity compared to the bare enzymes, these systems are promising candidate for biomedical and industrial processes, where the bare enzymes usually lose activities due to the harsh conditions.

[1] S. Sáringer, P. Rouster, I. Szilágyi, *Langmuir*, **2019** 35(14) 4986-4994.

[2] P. Rouster, M. Pavlovic S. Sáringer, S. Szilágyi, *Journal of Physical Chemistry C*, **2018** 122(21) 11455-11463.

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

INTERACTION OF HALF-SANDWICH (Cp*)Rh(III) CATION WITH HISTIDINE PEPTIDES AND THEIR TERNARY SPECIES WITH (N,N) BIDENTATE LIGANDS

Azza Hassoon^a, Attila Szorcsik^a, Ibolya Papp^b, Livia Fülöp^b, Zoltán Kele^b and Tamás Gajda^a

^a Department of Inorganic and Analytical Chemistry, University of Szeged, Hungary

^b Institute of Medical Chemistry, University of Szeged, Dóm tér 8, H-6720 Szeged, Hungary

In recent years an increasing number of half-sandwich (arene)Ru(II) complexes have been reported to possess significant anticancer activity, even against cancers that are not responsive to platinum drugs. Although, considerably less experimental data have been published for the isoelectronic (arene)Rh(III) compounds, several (η^5 -Cp*)Rh(III) complexes exhibit higher *in vitro* activity than the related Ru(II) complexes or even cisplatin. These Rh-based compounds can act using both DNA or enzymes as target, but even DNA targeting compounds may interact with proteins or endogenous peptides during drug-transport, e.g. may undergo ligand substitution reactions especially in the blood plasma. It is therefore of high interest to investigate reactions between potential metallodrugs and biomolecules. To this end, here we report systematic solution thermodynamic and solution structural study on the interaction of (Cp*)Rh(III) cation with histidine containing peptides and their constituents ((methyl)imidazole (**L**^{1(m)}), GGA-OH (**L**²), GGH-OH (**L**³), histidine-amide (**L**⁴), HGG-OH (**L**⁵), GHG-NH2 (**L**⁶). In order to mimic the interaction of the (Cp*)Rh(III)-based potentially anticancer/drug delivery agents with proteins, we also studied the (Cp*)Rh(III)-**L**-**B** ternary systems (where **B** = 2,2'-bipyridyl (bpy) or ethylene-diamine (en)).

The complex formation processes were fast enough up to pH 8 in all systems to apply the classical solution equilibrium approach, which was complemented by UV-Vis, ESI-MS and extensive 2D NMR investigations. The comparative evaluation of our data indicated that all ligands form highly stable complexes with (Cp*)Rh(III), and that (Cp*)Rh(III) cation is able to induce the deprotonation of amide nitrogen well below pH 7. Consequently, around the physiological pH the peptide ligands are coordinated to Rh(III) by a tridentate manner, with the participation of amide nitrogen. The (Cp*)Rh(III) binding affinity at pH 7.4 followed the order **L**¹ ~ **L**^{1m} << **L**² << **L**³ << **L**⁴ < **L**⁵ < **L**⁶. Consequently, the observed binding strength essentially depends on the presence and position of histidine unit within the peptide sequence. At pH 7.4 all histidine containing ligands form ternary complexes with strongly coordinating (N,N) bidentate ligands (en or bpy), in which the peptides are monodentately coordinated to Rh(III) through their imidazole N¹-nitrogens. Moreover, in the cases of **L**⁴, **L**⁵ and **L**⁶ the signals of binary peptide complexes were also present on the NMR spectra of ternary systems, indicating that these peptides are able to displace these powerful ligands from the coordination sphere of (Cp*)Rh(III). These behaviours may have important implication on the biospeciation and biotransformation of (Cp*)Rh(III) and related half-sandwich complexes in human bodies.

This research was supported by National Research, Development and Innovation Office (NKFIH) through the project GINOP-2.3.2-15-2016-00038. A. A. H. thanks Stipendium Hungaricum for her PhD fellowship, which is also supported by the Cultural Affairs & Mission Sector in Egypt.

COMPARATIVE SOLUTION STUDY ON ESTRONE SALICYLALDEHYDE (THIO)SEMICARBAZONES AND THEIR COPPER COMPLEXES: IMPACT OF HYBRIDAZATION AND METHYLATION

Tatsiana V. Petrasheuskaya,^a Márton A. Kiss,^b Orsolya Dömötör,^a Debora Wernitznig,^c Dominik Wenisch,^c Gabriella Spengler,^d Annamária Kincses,^d Nóra V. May,^e Bernhard K. Keppler,^c Éva Frank,^b Éva A. Enyedy,^a

^a Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Interdisciplinary Excellence Centre & MTA-SZTE Lendület Functional Metal Complexes Research Group, University of Szeged, Dóm tér 7, H-6720, Szeged, Hungary

^b Department of Organic Chemistry, University of Szeged, Dóm tér 8, H-6720, Szeged, Hungary

^c Institute of Inorganic Chemistry & Research Cluster 'Translational Cancer Therapy Research', University of Vienna, Währinger Straße 42, Vienna, Austria

^d Department of Medical Microbiology and Immunobiology, University of Szeged, Dóm tér 10, H-6720, Szeged, Hungary

^e Research Centre for Natural Sciences Hungarian Academy of Sciences, Magyar tudósok körútja 2, H-1117 Budapest, Hungary

(Thio)semicarbazones are considered to be potential therapeutics, since they possess a broad range of biological properties including antitumor, antimalarial and antimicrobial activity [1]. The biological properties of (thio)semicarbazones are often related to metal ion coordination. Ten novel (thio)semicarbazone derivatives and their copper complexes were synthesized, characterized and evaluated for their cytotoxicities in six human cancer cell lines and in multicellular 3D spheroids. Detailed solution equilibrium studies were performed to determine the proton dissociation processes of (thio)semicarbazone hybrids and their complex formation with copper(II) ions using UV-visible titrations. The thiosemicarbazones were able to form high stability complexes with copper(II), whereas semicarbazone complexes have significantly lower stability relative to the corresponding thiosemicarbazone analogues, most probable due to the different coordination mode. These results nicely related with obtained cytotoxicity data, which showed high anticancer activity of the copper(II)-thiosemicarbazone complexes compared with the semicarbazone analogues.

[1] P. Heffeter, et al., *Antioxid. Redox Signal.* 2019, 30, 1062-1082.

National Research, Development and Innovation Office-NKFIA projects GINOP-2.3.2-15-2016-00038, FK 124240 and FIKP program TUDFO/47138-1/2019-ITM. Visegrad Scholarship 52010752 (T. V. P.).

SYNTHESIS OF NOVEL THIOGLYCOSIDES VIA PHOTOINITIATED THIOL-ENE ADDITION REACTION

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

^a*University of Debrecen, Department of Pharmaceutical Chemistry, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.*

^b*University of Debrecen, Doctoral School of Pharmaceutical Sciences, 4032 Debrecen, Nagyterdei körút 98.*

^c*University of Debrecen, Doctoral School of Chemistry, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.*

Carbohydrates with α -glycosidic bonds can be found everywhere in the nature, from the simple procaryotes to the developed organisms. The *O*-glycosidic bond is, however, target of many enzymes and degrades in biological environments, so we focused our attention on synthesizing stable *S*-glycosidic analogues of biologically relevant and important carbohydrates. Thioglycosides are more resistant to enzymatic modification, therefore they are better suited for glycobiological and drug development studies. However, the formation of the extremely important 1,2-*cis*- α -thioglycosidic bond is a notoriously difficult task, so far no general method has been reported.

It has been found previously that the photoinitiated thiol-ene addition reaction could be applied to form tiodisaccharide mimetics with very high regio- and stereoselectivity *via* coupling exoglycals to carbohydrate thiols [1]. The substrate spectrum was extended to 2-substituted (2-acetoxy- or 2-acetamido-) glycals, and this method proved to be a very fast, reliable and cost-efficient method for the synthesis of the otherwise very difficult-to-form 1,2-*cis*- α -thioglycosidic bond [2]. We have also observed an unusual phenomenon: the conversion and the isolated yield was significantly better at lower temperatures whereas heating was detrimental for the completion [3, 4].

Numerous biologically relevant and potentially antibiotic thioglycosides have been synthesized using photoinitiated thiol-ene addition reaction. In this study the synthesis of these novel compounds is described in detail. We have extended the spectrum to a broad range of thiols and unsaturated carbohydrates and also thoroughly examined the effects of the various conditions (temperature, solvent, initiation time) on the conversion and isolated yield.

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

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

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

[4] V. Kelemen, M. Bege, D. Eszenyi, N. Debreczeni, A. Bényei, T. Stürzer, P. Herczegh, A. Borbás, *Chem. Eur. J.* 2019. 25, 14555-14571

This research was funded by Gedeon Richter's Talentum Foundation (1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.), the "Debrecen Venture Catapult Program" (EFOP-3.6.1-16-2016-00022, and EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00009), and the ÚNKP-19-3 New National Excellence Program of the Ministry for Innovation and Technology. The research was also supported by the EU and co-financed by the European Regional Development Fund under the project GINOP-2.3.2-15-2016-00008.

SZERVETLEN ÉS ANALITIKAI KÉMIA SZEKCÍÓ

A 2,4-DIPIKOLINÁT FÉLSZENDVICS RÓDIUM ÉS RUTÉNIUM KOMPLEXEI: OLDATEGYENSÚLY ÉS SZERKEZET

Mészáros János Péter^{a,b}, Németi Gábor^a, May Nóra V.^c, Enyedy Éva Anna^{a,b}

^aSzervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Interdiszciplináris Kiválósági Központ, Szegedi Tudományegyetem,
Dóm tér 7, 6720 Szeged, Magyarország

^bMTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, Dóm tér 7, 6720
Szeged, Magyarország

^cKémiai Krisztallográfiai Kutató Laboratórium, Természettudományi Kutatóközpont, Magyar tudósok körútja 2,
1117 Budapest, Magyarország

A félszendvics Ru-, Rh-, Ir- és Os-tartalmú komplexek több területen is ígéretes tulajdonságokat mutatnak, melyek eltérnek a klasszikus oktaéderes komplexeiktől. Antibakteriális, antivirális és rákellenes hatásukra is van példa [1]. Az (N,O) donatoromokat tartalmazó pikolinátok nagy stabilitású komplexeket hoznak létre a félszendvics kationokkal. Pl. a 2-pikolinsav ozmium(II)komplexének $IC_{50} = 4,2 \mu M$ értéke az A2780 rákos sejteken kiemelkedő toxicitást mutat, azonban a Ru- és Rh analógok kevésbé toxikusak [2]. A 2,4-dipikolinát szerkezete egy karboxilátcsoportban tér el a 2-pikolináttól: ez deprotonálódva egy extra negatív töltést ad, mely megváltoztathatja többek közt a citotoxicitást.

Jelen munkában félszendvics Ru- és Rh 2,4-dipikolináttal alkotott komplexeinek vizes oldatbeli viselkedését vizsgáltam. Megállapítottam, hogy a koordinált víz pK_a értéke, illetve a komplexek kloridion-affinitása az analóg pikolinát-komplexekhez képest megváltozik. Emellett a deprotonált karboxilátcsoport akár koordinálódhat is egy másik fémionhoz, ily módon érdekes üreges szerkezetet kaptunk. Az előállított egykristályok szerkezetének röntgentkristallográfiás vizsgálatával kapott adatait is részletesen elemeztük. Vizsgálatainkkal arra is választ szeretnénk volna kapni, hogy mi miatt veszíti el biológiai hatását egy extra negatív töltésű csoport bevitelével a komplex.

[1] U. Sliwinska, F. P. Pruchnik, S. Ułaszewski, M. Latocha, D. Nawrocka-Musiał, *Polyhedron*, **2010** (29) 1653-1659.

[2] A. F. A. Peacock, S. Parsons, P. J. Sadler, *J. Am. Chem. Soc.*, **2007** (129) 3348-3357.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott: ÚNKP-20-3-SZTE-544 kódszámú Új Nemzeti Kiválósági Program (M.J.P.), GINOP-2.3.2-15-2016-00038, FK 124240, PD 128504 és FIKP program TUDFO/47138-1/2019-ITM, illetve az MTA Bolyai János Kutatói Ösztöndíjának (M.N.V.) szakmai támogatásával készült.

A COTI-2 ÉS SZÁRMAZÉKAINAK OLDATKÉMIAI VIZSGÁLATA: KOMPLEKKÉPZŐDÉS VAS(III)-, RÉZ(II)-IONOKKAL

**Pósa Vivien^a, Julia H. Bormio Nunes^b, Bernhard K. Keppler^c, Christian R. Kowol^d,
Enyedy Éva Anna^a**

^a Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport,
Szegedi Tudományegyetem, Dóm tér 7, 6720 Szeged, Magyarország

^b Institute of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Vienna, Waehringer Strasse 42, 1090
Vienna, Austria

A tioszemikarbazonok és fémkomplexeik igen változatos szerkezetű és farmakológiai hatású vegyületek. Ezen vegyületek a szakirodalomban elfogadottak szerint a ribonukleotid-reduktáz enzim inhibitoraként hatnak. A legismertebb képviselőjük a 3-amino-piridin-2-karbaldehid-tioszemikarbazon, azaz a Triapine, mely klinikai fázis III tesztelés alatt áll [1]. A Triapine alkalmazását számos mellékhatás is kíséri (hányás, methemoglobinémia). Ezek a problémák további származékok fejlesztését ösztönözték, melyek között számos ígéretes vegyületet találunk, mint pl. a Dp44mT, COTI-2 vagy a DpC, melyek sokkal nagyobb citotoxicitást mutatnak, mint a Triapine. A hatóanyagok fejlesztése igényli, hogy ezeknek a vegyületeknek a szerkezet-aktivitás összefüggéseiről minél többet megtudjunk.

Munkánk elsődleges célja a COTI-2 és különböző származékainak oldatkémiai vizsgálata volt. Azt vizsgáltuk, hogy a különböző szerkezeti változtatások hogyan befolyásolják a proton disszociációs állandókat, a lipofilitást, és a membránpermeabilitást. A tioszemikarbazonok, ill. réz(II)- és vas(III)-komplexeik rákellenes hatása már régóta ismert, és számos olyan komplexet állítottak elő, amelyek a ligandumokhoz képest nagyobb aktivitással bírnak. Másrészt egyre több szó esik arról is, hogy a tioszemikarbazonoknak az emberi szervezetben lévő réz(II)ionokkal való komplexképződése is szerepet játszik a hatásmechanizmusban. Mindezek indokolták, hogy a vas(III)- mellett a réz(II)-ionokkal képzett komplexek oldatkémiai viselkedését is tanulmányozzuk a képződő fémkomplexek stabilitásán és redoxi tulajdonságaik összehasonlításán keresztül.

[1] <https://clinicaltrials.gov/ct2/show/NCT02466971?term=triapine&phase=2&draw=2&rank=1>
(2020.09.29.)

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-19-3-SZTE-242 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.

IN SITU KINETIKAI OLDHATÓSÁG MÉRÉS UV-SZONDA SEGÍTSÉGÉVEL

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

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

^b Pion Inc., Billerica MA, USA

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

A jelenlegi gyógyszerkincs közel 30%-a rossz vízoldhatósággal és jó permeabilitással rendelkezik, valamint becslések szerint az originális fejlesztésben lévő gyógyszerjelölt molekulák több, mint 80%-a is ebbe a csoportba sorolható. Ezen rossz vízoldhatóságú hatóanyagok biohasznosulásának javítása túltelítést eredményező formulációkkal egyre gyakoribb. Ilyen tömény túltelített oldatokat általában amorf szilárd diszperziók segítségével érnek el. Így az amorfizáció okozta biohasznosulás növekedés becslése *in vitro* módszerekkel a gyógyszeripari kutatások homlokterébe került. Legújabb kutatások szerint az amorf más néven kinetikai oldhatóság értéke egy fontos paraméter lehet a maximális biohasznosulás növekedés becslésében.[1] Ezért célul tűztük ki az amorf oldhatóság meghatározás módszerének fejlesztését *in situ* UV-szonda segítségével. Ehhez a munkához a Carvedilol rossz vízoldhatóságú modell hatóanyagot választottuk.

Az amorf oldhatóság mérés során törzsoldat segítségével egyre növekvő oldatkonzentrációt idéztünk elő és azt a koncentrációt kívántuk detektálni, ahol először történik csapadékkiválás. Az irodalomban a csapadék detektálására több módszert is alkalmaznak, leggyakrabban az UV spektrum alapvonalemelkedésén alapulót. Ez a módszer azonban nem feltétlenül elég érzékeny a nano mérettartományban megjelenő szilárd fázis detektálására, így munkánk során egy új UV spektrum kiértékelési módszert (ZIM) is alkalmaztunk, mely az UV spektrum második derivált függvényét használja fel. E két UV spektrum alapú módszer eredményét vetettük össze a dinamikus fényszórásméréssel is meghatározott amorf oldhatóság értékekkel és azt találtuk, hogy a ZIM módszer lényegesen érzékenyebb a csapadékkiválás érzékelésében, mint az alapvonal emelkedésén alapuló.

[1] A. Elkhaz, D. E. Moseson, J. Brouwers, P. Augustijns, L. S. Taylor; *Molecular Pharmaceutics*, **2019** 16, 12, 5042–5053

MELOXICAM TARTALMÚ TABLETTÁK IN VITRO KIOLDÓDÁSI PROFILJAINAK PREDIKTÁLÁSA GÉPI LÁTÁST ALKALMAZÓ RENDSZERREL

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

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

A hagyományos, szakaszos technológiákon alapuló gyógyszeriparban egyre nő az érdeklődés a folyamatos technológiák alkalmazása, megvalósítása iránt, mely átalakulási folyamat jelentős hatású a gyógyszerkészítmények gyártására, fejlesztésére és minőségbiztosítására. A gyógyszerhatóságok igyekeznek segíteni az iparág modernizációját, valamint támogatják a folyamatos technológiákban azon analitikai eszközök fejlesztését, melyek a folyamatfelügyelő és elemző rendszerekbe (PAT) integrálhatók, illetve hozzájárulnak a termékbe tervezett minőség (QbD) koncepciójának létrejöttéhez. A gyógyszeripari alkalmazás szempontjából a gépi látásban rejlő potenciál még nem került kiaknázásra, azonban várhatóan forradalmian új megoldásokhoz vezethet a folyamatos gyártástechnológiákban.

A gyógyszeriparban a szilárd gyógyszerformák minőségét hagyományosan offline, munkaigényes, lassú, destruktív módszerekkel vizsgálják, melyek a folyamatok valós időben történő követésére nem alkalmazhatók. Az előadásom során egy általam fejlesztett gépi látást alkalmazó rendszert mutatok be. Ennek célja olyan görbék alakjának prediktálása volt, melyet bevonat nélküli, meloxicam tartalmú tabletták *in vitro* kioldódási vizsgálatában kaptam. A predikciós modellhez szükséges bemeneti adatokat a képelemzésen alapuló szemcseméret eloszlások, valamint a szintén képelemzéssel kapott préselő értékek biztosították. A szemcseméret eloszlások meghatározásához ultraibolya fénnel, míg a préselő meghatározásához látható megvilágítással készített képeket használtam fel. Az *in vitro* kioldódási görbe alakokat a jelenleg is újdonságnak számító mesterséges neurális hálókkal prediktáltam.

Az általam fejlesztett, tabletták *in vitro* kioldódási profiljainak predikciójára szolgáló, gépi látást alkalmazó rendszer egy nem destruktív, új, egyszerűbb, olcsóbb, gyorsabb alternatívát nyújthat az ezen a területen jelenleg alkalmazott eszközökkel és módszerekkel szemben.

FIZIKAI KÉMIA SZEKCIÓ

A RÉSZECSKEMÉRET-CSÖKKENTÉS HATÁSA A KIOLDÓDÁSRA ÉS AZ OLDHATÓSÁGRA

Csicsák Dóra^a, Takácsné Novák Krisztina^a, Sinkó Bálint^b, Völgyi Gergely^a

^aGyógyszerészi Kémiai Intézet, Semmelweis Egyetem, Budapest

^bPion Inc., Billerica, USA

A gyógyszermolekulák biohasznosulását alapvetően meghatározzák azok fizikai-kémiai tulajdonságai. Ezek közül is a legfontosabbak az oldhatóság, az oldódás sebessége és a membránpermeabilitás, ugyanis az alacsony oldhatóság vagy a rossz permeabilitás nem megfelelő felszívódást eredményezhet.

Munkánk célja az volt, hogy különböző mikronizált és nanonizált gyógyszerhatóanyagok oldhatóságát és kioldódását vizsgálja in vitro körülmények között, biomimetikus közeget is alkalmazva. A nanonizált minták előállításához polimer segédanyag alkalmazása volt szükséges, amely megakadályozta a részecskeaggregációt, ez esetünkben polivinil-alkohol (PVA) illetve polivinil-pirrolidon (PVPK25) volt. Mivel ezen segédanyagok önmagukban is befolyásolhatják a kioldódást és az oldhatóságot, így a hatóanyagokhoz fizikai keverékként hozzáadva is végeztünk méréseket a jobb összehasonlíthatóság érdekében. A termodinamikai egyensúlyi oldhatóság meghatározása a telített rázó-tölcséres módszer szerint történt, a végső koncentrációt UV-spektrofotometriás módszerrel határoztuk meg. Amennyiben az oldhatóság ezt lehetővé tette, valós időben UV szondák segítségével követtük a hatóanyagok kioldódását, amely információt szolgáltatott a vegyület kioldódásának kinetikájáról valamint az egyensúly beállításához szükséges időről is.

Eredményeink azt mutatják, hogy a részecskeméret-csökkentés hatékony módja az oldhatóság és kioldódás javításának. A legmagasabb koncentrációt a nanonizált részecskék érik el, itt esetenként tízszeres egyensúlyi oldhatóságbeli különbséget is megfigyelhettünk a makrokristályos formához képest, azonban a legtöbb esetben már a mikronizálás is javította a vegyületek oldhatóságát. A segédanyagok a várttal ellentétben nem gyakoroltak hatást a kioldódásra illetve az egyensúlyi oldhatóságra, így elmondhatjuk, hogy az oldhatóság növekedése kizárólag a részecskeméret-csökkentés eredménye volt.

TELMISARTAN FIZIKAI-KÉMIAI PARAMÉTEREINEK VIZSGÁLATA, pH FÜGGŐ OLDHATÓSÁGÁNAK ANOMÁLIÁI ÉS AZOK MAGYARÁZATA

Kádár Szabina^a, Jaksáné Borbás Enikő^a, Csicsák Dóra^b, Takácsné Novák Krisztina^b, Völgyi Gergely^b, Pálta Tamás^b, Tóth Blanka^a, Nagy Zsombor Kristóf^a, Oksana Tsinman^c, Konstantin Tsinman^c, Sinkó Bálint^c

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

^bSemmelweis Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Intézet, 1092 Budapest, Högyes Endre utca 9.

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

A gyógyszervegyületek kémiaiailag különböző szerkezetűek, így viselkedésükben, valamint fizikai-kémiai paramétereikben is eltérnek egymástól. Ezen tulajdonságok ismerete elengedhetetlen a gyógyszerkutatás különböző területein, szükséges a gyógyszerformuláció optimalizálásához, valamint a fejlesztési szakaszban a várható farmakokinetikai viselkedés előrejelzéséhez is. A kutatómunkánk során modell hatóanyagként a BCS II. osztályba tartozó, rossz vízoldhatóságú telmisartant választottuk, mely amorf szilárd diszperzióként van jelen a forgalomban lévő gyógyszerkészítményekben. Ezen hatóanyag esetében az amorf forma oldhatósága két nagyságrenddel magasabb, mint a kristályos hatóanyagé, illetve vizes oldatai esetében nagy túltelítési arány érhető el, mely a telmisartanhoz hasonló anyagok esetében ritka [1-2].

Kutatómunkánk céljaként ezért a telmisartan fizikai-kémiai paramétereinek, valamint a pH-függő túltelítettségének vizsgálatát tűztük ki. A kutatásunk során meghatároztuk a hatóanyag pK_a értékeit különböző mérési módszerekkel (UV-pH titrálás, potenciometriás titrálás), valamint a pK_a értékek funkciós csoportokhoz rendelését NMR-pH titrálással, továbbá elvégeztük a termodinamikai és kinetikai oldhatóság, valamint a permeabilitás méréseket a teljes pH-tartományban, így lehetőség nyílt a hatóanyag oldhatóság-permeabilitás kölcsönhatásának megvizsgálására. Az oldhatóság mérések során szilárd mintavételt is végeztünk, amelyeket többféle módszerrel analizáltunk (röntgendiffrakció, infravörös spektroszkópia, polarizációs mikroszkóppal készített felvételek). Ezen felül szoftveres oldhatóság predikciót végeztünk, majd összevettük az eredményeinket a kapott prediktált értékekkel. Végül az aggregációs folyamat vizsgálata érdekében az oldatokat nagy felbontású tömegspektrometriával elemeztük.

[1] E. Borbas, Zs. K. Nagy, B. Nagy, A. Balogh, B. Farkas, O. Tsinman, K. Tsinman, B. Sinkó; *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, **2018** (114) 310-317.

[2] L. S. Taylor, G. G. Zhang; *Advanced Drug Delivery Reviews*, **2016** (101) 122-142.

EGY ÚJ DINUKLEÁRIS NIKKEL-KOMPLEX, MINT POTENCIÁLIS NiSOD MODELL

Bonczidai-Kelemen Dóra^a, May Nóra Veronika^b, Fábián István^{a,c}, Lihi Norbert^{a,c}

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2

^c MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1

A szuperoxid-dizmutáz nikkelt tartalmazó enzimjében a szuperoxid gyökkanionnal történő reakció során a fémion oxidációs száma +2 és +3 között változik. Az enzimben a fémion megkötéséért felelős régióban számos, oxidációra érzékeny aminosav található meg, azonban az oxidáció/redukció fémion központú. Kutatócsoportunk már korábban vizsgálta a fémion megkötése szempontjából kiemelt fontosságú NiSOD kötő hurkot és annak SOD aktivitását. Ugyanakkor a több fémiont tartalmazó metallopeptidek vizsgálatára eddig még nem került sor, habár maga az enzim is hat fémiont képes megkötni [1].

Munkánk során célul tűztük ki egy új, a lizin aminosav mentén párhuzamosan felépített NiSOD kötő hurkot tartalmazó peptid oldategyensúlyi-, spektroszkópiai- és SOD aktivitás vizsgálatát. Az eredményeink alapján vizsgált peptid rendkívül jó fémion megkötő sajátsággal bír, így már ekvimoláris oldatban dinukleáris komplexek alakulnak ki, amelyek jelenlétét CE-MS technika segítségével is igazoltuk. Kálium-szuperoxiddal a fémion és a ligandum arányának a függvényében különböző Ni(III) átmeneti állapotok alakulnak ki. Amikor a fémion kétszeres mennyiségben van jelen a ligandumhoz képest mindkét NiSOD kötő hurok telített és az enzimre jellemző koordinációs környezet alakul ki, amelyet ESR spektroszkópia segítségével is bizonyítottunk. Ez a dinukleáris részecske igen hatékony katalizátora a szuperoxid gyökkanion dizmutálási reakciójának, melynek során a reakcióban képződő Ni(III) intermedier felhalmozódik. Ennek eredményeképpen a fémion további reakcióban oxidálja a peptidvázat és a katalizátor hatékonyságát jelentős mértékben csökkenti [2].

[1] N. Lihi, D. Kelemen, N. V. May, I. Fábián *Inorganic Chemistry*, **2020**, 59(7) 4772-4780.

[2] D. Kelemen, N. V. May, M. Andrási, A. Gáspár, I. Fábián, N. Lihi *Chemistry - A European Journal*, **2020** DOI: 10.1002/chem.202002706.

A munka az NKFIH (PD 128326 és K 124983) anyagi támogatása mellett a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

FOLYÉKONY SZERVES VEGYÜLETEK, MINT HIDROGÉNTÁROLÓ RENDSZEREK: Ir(I)-NHC KOMPLEXEK AKTIVITÁSA HIDROGÉNEZÉSI- DEHIDROGÉNEZÉSI REAKCIÓKBAN

Orosz Krisztina^{a,b}, Joó Ferenc^a, Udvardy Antal^a, Papp Gábor^a, Kathó Ágnes^a, Horváth Henrietta^c

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

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

^c MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen

A megújuló energiaforrások által termelt energia biztonságos és reverzibilis tárolása mind az alap mind pedig az alkalmazott kutatások középpontjában állnak. Ennek egyik megvalósulási módja lehet a hidrogénben tárolt energia felszabadítása, például tüzelőanyag-cellákban elektromos áram termelhető káros anyag kibocsájtása nélkül. A molekuláris hidrogén biztonságos és reverzibilis kémiai tárolására sokféle javaslat, elképzelés létezik, a folyékony szerves hidrogéntároló rendszerek (melyek hidrogénezési, dehidrogénezési reakciókon alapulnak) alkalmazása univerzális megoldás lehet a problémára.

A kutatócsoportunk intenzív kutatásokat folytat a hidrogén tárolás témakörében, sikeresen megvalósították vizes közegben a formiátsók bontását, hidrogénkarbonátok hidrogénezését zárt és áramlós rendszerben egyaránt, ahol Ru és Ir alapú katalizátort alkalmaztak [1-2].

Munkánk során szintetizáltunk és alkalmaztunk számos új Ir(I)-NHC és Ir(I)-NHC-foszfin katalizátort (NHC = N-heterociklusos karbén, foszfin = PPh₃, mtp₃ms, mtp₂pts) ketonok homogén katalitikus hidrogénezésében [3-4]. Az előállított komplexek a ketonok hidrogénezésével képződött megfelelő szekunder alkoholok dehidrogénezését is aktívan katalizálták. Részletes vizsgálatokat végeztünk, hogyan hatnak a különböző fizikai és kémiai paraméterek az egyes rész folyamatokra.

[1] H. Horváth, G. Papp, H. Kovács, Á. Kathó, F. Joó; *International Journal of Hydrogen Energy*, **2019**, (44), 28527-28532

[2] H. Horváth, G. Papp, R. Szabolcsi, Á. Kathó, F. Joó: *ChemSusChem*, **2015**, (8), 3036.

[3] H. Horváth, Á. Kathó, A. Udvardy, G. Papp, D. Szikszai, F. Joó: *Organometallics*, **2014**, (33), 6330-6340.

[4] K. Orosz, G. Papp, Á. Kathó, F. Joó, H. Horváth: *Catalysts*, **2020**. (10) (1), 17.

A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alapnak (NKFI-FK128333) is.

TÁVOLSÁGSZEPARÁLT KÉTSZERES HIBRID SŰRŰSÉGFUNKCIONÁL- ELMÉLET GERJESZTETT ÁLLAPOTÚ SZÁMÍTÁSOKHOZ

Mester Dávid, Kállay Mihály

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék,
1111 Budapest, Budafoki út 6-8.*

Az időfüggő sűrűségfukcionál-elméleten (TDDFT) alapuló számítások esetén kvantitatív eredmények kizárólag a Hartree–Fock kicserélődési járulékot is tartalmazó ún. hibrid funkcionáloktól várhatóak. A hibrid TDDFT gerjesztési energiák pontossága vegyérték gerjesztések esetén megfelelő, azonban Rydberg és töltésátmenettel járó gerjesztések leírására, illetve kiterjedt π -elektronos rendszerekre már kevésbé kielégítő.

A módszerek javítására az elmúlt években két lehetőség terjedt el. Az egyik, hogy a korrelációs energiát egy bizonyos arányban hullámfüggvény-alapú módszerekkel számítjuk [1]. Ezen funkcionálokat kétszeres hibrid funkcionáloknak nevezzük. A másik lehetőség, hogy a részecskék közötti kölcsönhatásokat szeparáljuk a távolság függvényében, és kis távolságnál DFT módszerekkel, míg nagy távolságnál hullámfüggvény-alapú módszerekkel számítjuk az egyes járulékokat [2].

A két eljárás egyesítésére TDDFT szinten eddig egyetlen próbálkozás valósult meg [3], azonban a felírt energiaképlet csak bizonyos típusú gerjesztések esetén előnyös, illetve nem általánosítható a gyakorlatban tetszőleges funkcionálokra. Munkánk során kiterjesztettük a Toulouse és munkatársai által kidolgozott ansatzot [4] gerjesztett állapotú számításokhoz, amely a távolságszeparálást a kicserélődési- és korrelációs energijárulékokra egyaránt alkalmazza. Az így kapott elmélet konzisztensen jobb eredményeket szolgáltat, mint a korábbi próbálkozás, illetve tetszőlegesen alkalmazható bármilyen funkcionál esetén. Előadásomban részletesen bemutatom a két eljárás közti különbséget, illetve az összehasonlító számításokból kapott eredményeket.

[1] S. Grimme, F. Nesse, *J. Chem. Phys.*, **2007** (127) 154116.

[2] T. Yanai, D. P. Tew, N. C. Handy, *Chem. Phys. Lett.*, **2004** (393) 51.

[3] M. Casanova-Páez, M. B. Dardis, L. Goerigk, *J. Chem. Theory Comput.*, **2019** (15) 4735.

[4] C. Kalai, J. Toulouse, *J. Chem. Phys.*, **2018** (148) 164105.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-4 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

METANOL ÉS SZUPERKRITIKUS SZÉN-DIOXID ELEGYEDÉSI TULAJDONSÁGAINAK VIZSGÁLATA SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓS MÓDSZEREKKEL

Horváth Réka Anna^a, Horvai György^b, Abdenacer Idrissi^c, Jedlovsky Pál^d

^a*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem Rkp. 3. F ép. I.lh. mfszt.*

^b*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest, Szent Gellért tér-Műegyetem 4.*

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

^d*Eszterházy Károly Egyetem, Kémia Tanszék, 3300 Eger, Leányka u. 6.*

A metanol és szuperkritikus szén-dioxid elegyítése során extenzív állapotjelzők– térfogat, energia, szabadenergia, entrópia – megváltozását Monte Carlo számítógépes szimulációk és termodinamikusan integrálás segítségével határoztuk meg két szén-dioxid és négy metanol potenciálmodellből alkotott nyolc modell kombináció esetén tizenegy különböző összetétel mellett 313 K-en. A kapott eredményeket kísérleti eredményekkel hasonlítottuk össze, ahol erre lehetőség nyílt.

A vizsgálatunk megmutatta, hogy körülbelül 95 mol% szén-dioxid tartalomnál a rendszer folyadék fázisból szuperkritikus állapotba kerül minden modell kombináció esetében. A szuperkritikus állapotú rendszerekben az elegyedési szabadenergia minden esetben pozitívnak adódott, így ebben a koncentráció tartományban azt találtuk, hogy a két komponens egymással nem elegyedik. Eredmények alapján az is kijelenthető, hogy mind a nem elegyedés a szuperkritikus tartományban, mind pedig az elegyedés a szén-dioxidban szegényebb, folyadék állapotú rendszerekben elsősorban energetikai okokra vezethető vissza, hiszen az elegyedési entrópia értéke minden esetben nagyon közel esik a nullához, és ráadásul a szuperkritikus tartományban ennek kvalitatív viselkedése is jelentősen függ a választott modellektől.

Emellett azt is megmutattuk, hogy a metanol expanziós koefficiense nem függ jelentősen a potenciálmodell megválasztásától, és minden esetben jó egyezést mutat a kísérleti adatokkal. Azonban mind az elegyedési térfogat, mind pedig az elegyedési energia erősen függ a tiszta szén-dioxid moláris térfogatától, és ebben a tekintetben a TraPPE szén-dioxid modell [1] sokkal jobb egyezést mutat a kísérleti értékekkel, mint a Zhang és Duan által fejlesztett modell [2].

[1] J. J. Potoff és J. I. Siepmann, *AIChE J.* 2001, **47**, 1676

[2] Z. Zhang and Z. Duan, *J. Chem. Phys.* 2005, **122**, 214507

LIPOSZÓMÁS HATÓANYAGOK IN VITRO KIOLDÓDÁSI GÖRBÉINEK NEMLINEÁRIS MODELLEZÉSE TÁBLÁZATKEZELŐ ALAPÚ ELJÁRÁSSAL

Seres László^a, Juhász Ádám^{a,b}, Ungor Ditta^a, Berta Katalin^a, Csapó Edit^{a,b*}

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

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

A formulázott gyógyszerhatóanyagok in vitro kioldódás vizsgálata során az idő függvényében rögzített koncentráció profilok feldolgozása általában az alkalmazott matematikai modell linearizálásán, ezáltal a mérési adatok valamely szintű transzformációján alapul [1]. Az informatika fejlődésével azonban ezek az „egyszerűsítő” módszerek közel harminc éve feleslegessé váltak [2]. Munkáknak során olyan univerzális táblázatkezelő alapú adatkiértékelési eljárást fejlesztettünk, amely a linearizálás nélkül képes a kísérleti adatokra illeszteni az elterjedten használt kioldódás kinetikai összefüggéseket [3]. Ezen felül a kidolgozott rutin lehetőséget nyújt az illesztési paraméter sztenderd deviációjának számítására is [4]. Az eljárás ellenőrzésének céljából méretszabályozott liposzómákat állítottunk elő, amelyeket eltérő technikák révén fluoreszcens (Rodamin-B) festékkel töltöttünk meg. A liposzómás hatóanyag szállító rendszereket hatóanyag tartalmuk, átlagos átmérőjük és kolloid stabilitásuk tekintetében vizsgáltuk és hasonlítottuk össze. Ezek után fiziológiás körülmények között figyeltük meg és rögzítettük a festék, in vitro kioldódását a liposzómális kolloid rendszerből. A kioldódási profilok kiértékelése alapján megállapítottuk, hogy a méretszabályozás megfelelő megválasztása mellett a kapszulázás módja is jelentősen elnyújthatja a modell hatóanyag felszabadulását. Továbbá rámutattunk arra, hogy linearizált kinetikai modellek alkalmazása pontatlanságuk mellet félrevezető lehet a megfelelő modell megválasztást illetően is.

[1] N. Varga, M. Benkő, D. Sebők, G. Bohus, L. Janovák, I. Dékány; Microporous Mesoporous Materials, **2015** (213) 134–141.

[2] E. Csapó, H. Szokolai, Á. Juhász, N. Varga, L. Janovák, I. Dékány; Carbohydrate Polymers, **2018** (195) 99–106.

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

[4] Á. Juhász, E. Csapó, D. Ungor, G.K. Tóth, L. Vécsei, I. Dékány; The Journal of Physical Chemistry B, **2016** (120) 7844–7850.

A bemutatott kutatási munka az FK 131446 OTKA és a GINOP-2.3.2-15-2016-00060 pályázat, valamint a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült. A szerzők ezúton is köszönetet mondanak az idézett cikkekben szereplő társszerzők közreműködéséért.

FELÜLETI PLAZMON REZONANCIA SPEKTROSKÓPIA ALKALMAZÁSA RECEPTOR-LIGANDUM JELLEGŰ KÖLCSONHATÁSOK TERMODINAMIKAI JELLEMZÉSÉRE

Gombár Gyöngyi^a, Juhász Ádám^{a,b}, Csapó Edit^{a,b}

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

^b MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, H-6720, Dóm tér 8, Szeged, Magyarország

Az elmúlt évtizedekben a receptor-ligandum jellegű kölcsönhatások termodinamikai jellemzésére leguniverzálisabban alkalmazható kísérleti technika az izoterm titrációs kalorimetria (ITC) volt, míg a kérdéses folyamatok modellezését a számítástechnika fejlődésével a molekuladinamika uralta. A határfelületeken végbemenő szorpciós jelenségek kvázi kétdimenziós vizsgálatát lehetővé tevő szenzortechnikák fejlődésével új megközelítésben váltak vizsgálhatóvá az említett kölcsönhatások. A kvázi kétdimenziós eljárások közül a kvarckristály mikromérleg (QCM) módszer, valamint az optikai hullámvezető fénymódus- (OWLS) és a felületi plazmon rezonancia (SPR) spektroszkópia vált széles körben alkalmazottá. Ezek által a kölcsönható pár egyikének szenzorfelülethez történő rögzítésére során a szilárd/folyadék határfelületen kialakított biomimetikum révén végezhetők kvantitatív vizsgálatok. A kvázi kétdimenziós szilárd fázis kialakításától függően lehet egy sejtmembránt alkotó szolvatált lipid kettősréteg vagy fehérje alegységek alkotta negyedleges szerkezet modellje. A bemutatásra kerülő kutatási munka az alfa-amino-3-hidroxi-5-metil-4-isoxazol-propionsav (AMPA) receptor modellek és neuroaktív kismolekulák közötti kölcsönhatás jellemzésére irányuló projekthez kapcsolódik [1-3]. Ennek keretében az SPR által rögzített szenzorgramok koncentráció- és hőmérséklet-függésének ismeretében, pszeudo elsőrendű kinetikai közelítés által határoztam meg a kötési állandó értékét és annak hőmérsékletfüggését. Majd a van 't Hoff reláció alapján számítottam egy szintetikusan előállított és idegtudományi kutatásokban ígéretesnek bizonyuló kinurénsav származék szérum fehérjéken, valamint AMPA receptor modellen végbemenő kötődéséhez rendelhető entalpia-, entrópia- és hőkapacitás-változás értékeket, amelyek ismeretében megerősíthető a molekuladinamika számítások alapján feltételezett kötési mód.

- [1] Á. Juhász, E. Csapó, D. Ungor, G.K. Tóth, L. Vécsei, I. Dékány, *The Journal of Physical Chemistry B*. 120 (2016) 7844–7850
[2] Á. Juhász, M. Luty-Błocho, M. Wojnicki, G.K. Tóth, E. Csapó, *Microchemical Journal*. 147 (2019) 311–318
[3] V. Hornok, Á. Juhász, G. Paragi, A.N. Kovács, E. Csapó, *Journal of Molecular Liquids*. 313 (2020) 112869

A bemutatott kutatási munka a GINOP-2.3.2-15-2016-00034 és az FK 131446 OTKA pályázat, valamint a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült. A szerzők ezúton is köszönetet mondanak az idézett cikkekben szereplő társszerzők közreműködéséért.

SZERVES KÉMIAI SEKCIÓ II.

POLI(ETILÉN-TEREFTALÁT) BONTÁSA VISSZAFORGATHATÓ ORGANOKATALIZÁTOROK SEGÍTSÉGÉVEL

Fehér Zsuzsanna^a, Kiss Johanna^a, Diana Daicu^a, Kisszékelyi Péter^a, Nagy Sándor^a, Kárpáti Levente^b, Huszthy Péter^a, Kupai József^a

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

^b*Downstream Hungary, Polyolefin R&D, MOL Nyrt.*

A huszonegyedik században a műanyagok újrahasznosítása rendkívüli fontosságú, mind a környezetszennyezés csökkentése, mind pedig a meg nem újuló energiaforrások megtakarítása érdekében. A poli(etilén-tereftalát) (PET) egy széleskörben, főként csomagoláshoz felhasznált, biológiailag nem lebomló polimer, így nagymértékben hozzájárul a Földünk szennyezéséhez. Ezért nem meglepő, hogy ennek a műanyagnak a lebontása nagy érdeklődést váltott ki a kutatókból.

Munkánk során használt PET-palackokból készült örleményt bontottunk le glikolízissel bisz(2-hidroxietyl)-tereftalát (BHET) monomerré. A reakció során az etilén-glikol tölti be a reagens és az oldószer szerepét is. A lebontást bombacsőben, magas hőmérsékleten (170 °C–190 °C), argon-atmoszféra alatt hajtottuk végre. Katalizátorként a kereskedelmi forgalomban kapható funkcionális szilikagél, illetve a szilikagélhez rögzített 1,5,7-triazabiciklo[4.4.0]dec-5-ént (TBD) alkalmaztunk. A szilikagél szilárd hordozó előnye, hogy lehetővé teszi a szerves bázis visszaforgatását, ezzel fenntarthatóvá téve a folyamatot. Miután azt találtuk, hogy a legstabilabb és a legaktívabb katalizátor a trialkil-amin funkcionális szilikagél, optimalizáltuk a reakcióparamétereket (hőmérséklet, reagens és katalizátor mennyisége, reakcióidő). Ezzel sikerült kiváló konverzióval (96%) lebontani a PET-et BHET-vé.

A szerzők köszönik az OTKA (K128473), a Bolyai János Kutatói Ösztöndíj, az Új Nemzeti Kiválóság Program ÚNKP-20-5-BME-322 (KJ) és a Richter Talentum Alapítvány anyagi támogatását.

LIPOFIL OLDALLÁNCAL MÓDOSÍTOTT CINKONA ORGANOKATALIZÁTOROK

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

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

Napjainkban környezetvédelmi és gazdaságossági szempontból egyaránt fontos feladat az organokatalizátorok visszaforgatása. Erre hatékony és egyszerű megoldást jelent, ha megváltoztatjuk a reakcióelegy komponenseinek oldhatóságát egymáshoz képest. Ez többek közt az organokatalizátorra történő lipofil oldallánc beépítésével érhető el [1]. Az így adódó jelentős különbség a katalizátor és a reakcióelegy többi komponensének polaritása között lehetővé teszi, hogy azokat egy oldószercserét követő szűréssel, vagy egy extrakciós lépéssel elválasszuk egymástól.

Célkitűzésünk egy új szintetikus módszer kidolgozása volt, mellyel lipofil oldalcsoport építhető be a katalizátorokra. Ehhez először metil-gallátból kiindulva egy három oktadecilcsoportot tartalmazó karbonsavszármazékot állítottunk elő. Ezt a lipofil egységet savamidképzési reakcióval rögzítettük egy cinkona-négyzetamid organokatalizátorra (egy aminoetil linkerrel keresztül), amely korábban kitűnő enantioszelektivitás elérését tette lehetővé *Michael*-addíciós reakciókban [2,3]. Az amidképzésnél savkloridképzést és kapcsolószerek alkalmazását is vizsgáltunk. A kapott lipofilezett katalizátort a jövőben különböző aszimmetrikus konjugált addíciós reakciókban tervezzük alkalmazni.

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

[2] S. Nagy, Z. Fehér, G. Dargó, J. Barabás, Z. Garádi, B. Mátravölgyi, P. Kisszékelyi, G. Dargó, P. Huszthy, T. Höltzl, G. T. Balogh, J. Kupai, *Materials*, **2019** (12) 3034-3048.

[3] C. Didaskalou, J. Kupai, L. Cseri, J. Barabas, E. Vass, T. Höltzl, G. Székely, *ACS Catal.*, **2018** (8) 7430-7438.

A szerzők köszönik az Innovációs és Technológiai Minisztérium Új Nemzeti Kiválóság Programja (ÚNKP-20-5-BME-322), az OTKA (K128473), a Bolyai János Kutatói Ösztöndíj és a Richter Gedeon Talentum Alapítvány anyagi támogatását.

DISZUBSZTITUÁLT AMINOSAVAKHOZ VEZETŐ INTERMEDIEREK ENANTIOSZELEKTÍV SZINTÉZISE ÉS OPTIMALIZÁLÁSA

Richter Dóra^a, Fehér Zsuzsanna^a, Nagy Sándor^a, Bagi Péter^a, Huszthy Péter^a, Kupai József^a

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

Munkám során célul tűztam ki újfajta királis fázistranszfer organokatalizátorok előállítását. A fázistranszfer képességet koronaéter részlet beépítésével biztosítottam, királis indukciót kiváltó szerkezeti egységként pedig cinkona származékokat, illetve glükózt kapcsoltam hozzá négyzetamidon keresztül. A katalizátorok aktivitását benzilezett malonát származék aszimmetrikus alkilezésében kívántam vizsgálni, ugyanis az így előállított termék kulcsintermedierként szolgál enantiomertiszta α,α -diszubsztituált aminosavak előállításához, amely vegyületcsalád egyes képviselői antibakteriális tulajdonságokkal bírnak [1]. Az aminosavak előállítása a köztitermékekből szelektív hidrolízist követő átalakításokkal lehetséges.

Össze kívántam hasonlítani a cinkona egységek, valamint a glükóz hatását az enantioszelektivitásra, így kinin, hidrokinin, cinkonin és glükóz részleteket építettem a molekulákba. Továbbá annak érdekében, hogy a reakciót az alkalmazott bázis szempontjából is vizsgálni lehessen, ötös és hatos tagszámú koronaéterekkel kapcsoltam az előbbi vegyületeket, ezzel lehetővé téve nátrium és kálium alapú bázisok használatát is.

Az elvégzendő próbareakciót optimalizálni kívántam az oldószer, a bázis, a reagens arány, valamint a reakcióhőmérséklet szempontjából. Az így kapott leghatékonyabb körülmények között kívántam vizsgálni további alkilezőszereket is, mint a C-alkilezési reakció szubsztrátjait.

[1] T. Kanemitsu, S. Koga, D. Nagano, M. Miyazaki, K. Nagata, T. Itoh, *ACS Catalysis* **2011** (1) 1331-1335.

A szerzők köszönik az OTKA (K128473), a Bolyai János Kutatói Ösztöndíj, az Új Nemzeti Kiválóság Program ÚNKP-20-5-BME-322 (KJ) és a Richter Talentum Alapítvány anyagi támogatását.

POTENCIÁLIS BIOAKTIVITÁSSAL RENDELKEZŐ CINKONA ALAPÚ ORGANOKATALIZÁTOROK VIZSGÁLATA

Pósa Szonja Polett^{a,b}, Dargó Gyula^a, Tóth Szilárd^b, Hámori Lilla^b, Huszthy Péter^a, Kupai József^a

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

^b*TTK Enzimológiai Intézet, 1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.*

Az organokatalizátorok egy jelentős képviselői a cinkona alkaloidok, amelyek kémiai szerepük mellett változatos biológiai hatással is rendelkeznek. Ennek kiváló példája a kinin, amely egy régóta ismert és alkalmazott maláriaellenes szer, rákellenes hatással is rendelkezik, így érdekes kérdésként vetődhet fel további organokatalizátorok bioaktivitásának, rákellenes toxicitásának vizsgálata.

A rosszindulatú tumorok kezelése során alkalmazott kemoterápia gyakran azért vall kudarcot, mert a tumorsejtek rezisztenssé válnak az alkalmazott citotoxikus szerekre, kialakul a multidrog rezisztencia (MDR). Az MDR egyik legjelentősebb mechanizmusa az ABC (ATP-binding cassette) transzporterek családjába tartozó P-glikoprotein (Pgp, ABCB1, MDR1) fehérje fokozott expressziója, amely számos kemoterápiás vegyületet szubsztátjaként ismer fel [1]. Célunk a kininből kiindulva olyan amin, tiokarbamid és négyzetamid származékok szintézise volt, amelyek a kutatócsoportunk korábbi eredményei alapján feltételezhetően képesek eliminálni a Pgp-t túlexpresszáló multidrog rezisztens sejteket, a pumpát megkerülve bejutni a sejtbe és/vagy inhibitoroként a Pgp efflux funkcióját gátolni, ezáltal egy lehetséges új alkalmazási területet nyitva a korábban hagyományosan organokatalizátor funkciót betöltő vegyületeknek. A szintetizált vegyületek tesztelését parentális és MDR rákos sejtvonalakon végeztük. Citotoxicitás és rezisztencia terén is sikeresen jellemeztük a kemotípusokat.

[1] G. Szakács, J. K. Paterson, J. A. Ludwig, C. Booth-Genthe, M. M. Gottesman, *Nature Reviews Drug Discovery*, **2006** (5) 219–234.

A szerzők köszönik az OTKA (K128473), a Bolyai János Kutatói Ösztöndíj, az Új Nemzeti Kiválóság Program ÚNKP-20-5-BME-322 (KJ) és a Richter Talentum Alapítvány anyagi támogatását.

D-GALAKTÓZALAPÚ KORONAÉTEREK SZINTÉZISE ÉS ALKALMAZÁSA ASZIMMETRIKUS REAKCIÓKBAN

Orbán István, Rapi Zsolt, Bakó Péter

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

A szupramolekuláris kémia a kémiai tudományok manapság egyik legnagyobb léptékben fejlődő területe. Olyan szerkezetekkel foglalkozik, melyeket elsősorban nem kovalens hanem több ponton ható másodlagos kötőerők tartanak össze [1]. Ilyen komplex rendszert képesek létrehozni a makrociklusos poliéterek közé tartozó királis koronaéterek is. Segítségükkel bizonyos kémiai reakciókban elérhető, hogy enantiomertisztán vagy enantiomerfelesleggel képződjön a kívánt termék.

Kutatócsoportunkban nagy múltja van a szénhidrátalapú királis koronaéterek szintézisének, illetve aszimmetrikus reakciókban való használatuknak [2], munkám során pedig célul tűztam ki azt, hogy új D-galaktózalapú királis makrociklusokat szintetizáljak.

A csoportban eddig legtöbbet a D-glükózalapú koronaéterek szintézisével és vizsgálatával foglalkoztak. A közelmúltban bebizonyosodott egy galaktóz egységet tartalmazó makrociklusról, hogy enantioszelektivitása több esetben eléri vagy meghaladja a kutatócsoportban előállított analóg szerkezetű, ám glükóz egységet tartalmazó makrociklusét. Az általam előállított koronavegyületekben újdonság egyrészt a 4,6-benzilidén-acetál szerkezet helyett a kevésbé merev, de egyben savra nem érzékeny 4,6-di-O-benzil védőcsoport a galaktopiranozid egységen, másrészt a nitrogénnel kialakított 2-(2-metoxifenil)-etil, valamint 2-(3,4-dimetoxifenil)-etil oldallánc.

Az új katalizátorokat két folyadék-folyadék fázistranszfer reakcióban teszteltem: 2-klóracetofenon és benzaldehid Darzens-kondenzációjában, illetve *transz*-kalkon *terc*-butilhidroperoxiddal történő epoxidációjában. Ezekben a reakciókban jó termelés (77-95%) mellett változó enantiomerfelesleggel (6-68%) keletkeztek a termékek.

Vizsgáltam még az (*E*)-3-fenil-2-(fenilszulfonil)-akrilnitril és dietil-brómmalonát között nátrium-karbonát segítségével lejátszódó reakciót is. A szilárd-folyadék kétfázisú reakcióban az új katalizátorok kitűnő termelést (93-95%) és jó enantiomerfelesleget (76-80%) értek el.

[1] R. G. Chapman, J. C. Sherman; *Tetrahedron* **1997**, (53), 15911-15945.

[2] P. Bakó, Zs. Rapi, Gy. Keglevich; *Periodica Polytechnica* **2015**, (59) 51-58.

KIRÁLIS CIKLOPROPÁN-SZÁRMAZÉKOK ELŐÁLLÍTÁSA SZÉNHIDRÁTALAPÚ KORONAÉTEREK FELHASZNÁLÁSÁVAL

Varga Bertalan, Rapi Zsolt Bakó Péter

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

A ciklopropán gyűrű számos természetes vegyület és biológiailag aktív anyag építőeleme [1], melyek esetenként vírus-, baktérium-, vagy tumorelles hatással rendelkezhetnek [2]. A ciklopropán-származékok fontos intermedierek a preparatív kémiában is, korábban számos szintézisben sikeresen alkalmazták már őket [3-5]. Előállításukra az egyik legáltalánosabb módszer a *Michael*-iniciált gyűrűzárás (MIRC), amely megvalósítható aszimmetrikus fázistranszfer katalízis körülmények között. A szénhidrátok olcsó, természetes, nem mérgező vegyületek, a belőlük felépített koronaéterek pedig optikailag aktív, fázistranszfer katalizátorként alkalmazható makrociklusok.

A kutatócsoportunkban vizsgálták dietil-brómmalonát reakcióját benzilidén-malonitril, illetve benzilidén-cianoszulfon-származékokkal, szilárd-folyadék fázistranszfer körülmények között. A *Michael*-addíciós reakciókban általában hatásosnak bizonyult glükóزالapú, hidroxipropil oldalkarral rendelkező koronaéter ezekben a reakciókban nem eredményezett nagy enantiomerfelesleget (32% és 50% ee), a *Michael*-akceptor származékainak esetében azonban már nagyobb ee értékeket mértünk (99% enantiomerfelesleg). Később a reakciókat elvégeztük L-treitol- és D-galaktóزالapú koronaéterek felhasználásával is, melyek több esetben is 80%-nál nagyobb ee értéket generáltak. A szerkezet-hatás összefüggések vizsgálata alapján az aszimmetrikus indukció mértékét a kiindulási cukorvegyület és a monoaza-15-korona-5 gyűrű nitrogénatomján lévő oldalkar nagymértékben befolyásolja.

Vizsgáltuk más *Michael*-akceptor, a benzilidén-ciánecetészter ciklopropanálását is. A kiindulási vegyületet és analogonjait a hagyományos *Knoevenagel*-kondenzáció körülményeitől eltérően alumínium-oxiddal katalizálva állítottam elő, ezzel gyorsabban, kevesebb tisztítási lépéssel jutottam a termékekhez. A benzilidén-ciánecetészter MIRC-reakciójának vizsgálata során első lépésben a katalizátor optimalizálását végeztem el. A legnagyobb aszimmetrikus indukciót (89% ee) egy D-glükóزالapú, feniletil oldalkarral rendelkező koronaéter generálta.

A jövőben tervezem az oldószer és a bázis optimalizálását, végül optimális körülmények között a benzilidén-ciánecetészter származékaival a katalitikus rendszer robusztusságát is vizsgálni fogom.

[1] R. Faust; *Angewandte Chemie – International Edition*, **2001** (40) 2251-2253.

[2] J. Salaün; *Topics in Current Chemistry*, **2000** (207) 1-67.

[3] H. U. Reissig; *Topics in Current Chemistry*, **1988** (144) 73-135.

[4] D. C. Nonhebel; *Chemical Society Reviews*, **1993** (22) 347-359.

[5] Z. Goldschmidt, B. Crammer; *Chemical Society Reviews*, **1988** (17) 229-267.

AKR1C(1-3) ENZIMEK INHIBITORAINAK VIZSGÁLATA MOLEKULAMECHANIKAI MÓDSZEREKKEL

Antal Attila Patrik^{a,b}, Mernyák Erzsébet^a, Paragi Gábor^{b,c}

^a Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszék, 6720, Szeged, Dóm tér 8.

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

^c PTE Fizikai Intézet, 7624 Pécs, Ifjúság útja 6.

Az AKR1C enzimek aldo-keto reduktázok, amelyek a szervezet szteroid metabolizmusában töltenek be fontos szerepet. Képesek hormonálisan aktív vegyületek (ösztrogének, androgének, progeszteron) inaktiválására, illetve ezen folyamatokkal ellentétesen hormonok szintézisére is [1]. Rákos sejtekben, gyakran a kemoterápiás szerek okozta oxidatív stresszre adott válaszként, megemelkedik ezen biokatalizátorok mennyisége, amelyek képesek redukció révén eltávolítani a képződött reaktív oxigén elemeket, így rezisztens malignus tumorok alakulhatnak ki [4]. Az egyes enzim altípusok tehát gyakran egy metabolikus útvonalban vesznek részt, és egymással ellentétesen hatnak, mindezek alapján kiemelten fontos olyan inhibitorok kifejlesztése, amelyek szelektíven képesek gátolni az egyes enzim izoformákat.

A közelmúltban, a Szerves Kémiai Tanszék Szteroidkémiai Kutatócsoportjában, A-gyűrűben halogénezett 13 α - és 13 β -ösztörön származékokat állítottak elő, majd együttműködésben in vitro vizsgálták azok AKR1C enzimekre gyakorolt hatását. A tesztvegyületek közül 6 potens inhibitor szelektíven gátolta az adott enzim működését.

Jelen vizsgálatban a biológiai eredmények mélyebb megértése érdekében, illetve újabb jelöltek tervezésének elősegítésére számítógépes szimulációt végeztünk az AKR1C(1-3) enzimek esetében. Ennek első lépéseként olyan számítógépes modellt akartunk kifejleszteni, mely képes visszaadni a biológiai mérések főbb jellegzetességeit: C1-C3 enzimszelektivitás, esetleges kötési preferencia sorrendek. Ezen felül vizsgálni kívántuk, hogy az inhibitor enzimhez való kötődése (amennyiben az aktív centrumban történik), az enzim redukált (NADPH) vagy oxidált (NADP⁺) kofaktorról való kapcsolódása során valósul meg.

Az egyes enzimek kiinduló 3D-s modelljét a Protein Adatbankból (PDB adatbázis, www.pdb.org) vettük, melyet a Schrödinger Suits programcsomag különböző moduljainak alkalmaztatásával finomítottunk tovább [3]. Nevezetesen, egy rövid molekuladinamikai (MD) szimulációval határoztuk meg a dokkoláshoz használt target szerkezetét, majd dokkolást végeztünk az így megalkotott enzim modelleken, és megvizsgáltuk, hogy a scoring értékek mennyiben képesek visszaadni a biológiai mérésben tapasztalt szelektivitási tulajdonságokat. Mivel igen eltérő kötésmódok is megjelentek a dokkolás eredményeként, hosszabb MD szimulációk segítségével meghatároztuk a kapott ligandum-fehérje komplex stabilitását. Ezek a vizsgálatok egyben lehetőséget adtak fejlettebb kötési szabadenergia meghatározására, nevezetesen az MM-GBSA módszer alkalmazásával.

[1] T.L. Riziner, T. M. Penning, *Steroids*, **2014** (79) 49–63.

[2] H.B. Deng, M. Adikari, H.K. Parekh, H. Simpkins, *Cancer Chemotherapy and Pharmacology*, **2004** (54) 301–307.

[3] Schrödinger Suits. Release 2020-3_Schrödinger, LLC, New York, NY, **2020**

Köszönjük az OTKA SNN 1234329 támogatását.

ÁTMENETIFÉM-KATALIZÁLT KERESZTKAPCSOLÁSI ÉS C-H AKTIVÁLÁSI REAKCIÓK A 13 α -ÖSZTRON SORBAN

Traj Péter, Németh Anett, Dajcs Trisztán Sámuel, Mernyák Erzsébet

Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar Szerves Kémiai Tanszék, H-6720 Szeged, Dóm tér 8.

Az ezredfordulót követően az átmenetifém-katalizált keresztkapcsolási reakciók széleskörűen alkalmazott eljárások, mivel olyan reakciók kivitelezését teszik lehetővé, amelyek korábban nem, vagy csak rendkívül alacsony hozammal és szelektivitással voltak megvalósíthatók. Ezek között elterjedtek az aril-halogenidek Pd-katalizált C-C, C-N vagy C-P reakciói.

Napjainkban, a zöld kémia alapelveinek eleget téve, olyan eljárások kerülnek előtérbe, amelyek nem aril-halogenidből, hanem fenolészter származékból indulnak ki. A fenolok karbamoil-, pivaloil- és szulfamoil-származékai számos átalakítási lehetőséget nyújtanak.

Munkánk célja a 13 α -ösztron és 17-dezoxi-származékának fenolos hidroxilcsoportján olyan heteroatomot tartalmazó funkciós csoport kiépítése volt, amely jó távozó- vagy irányító csoportként szerepelhet átmenetifém-katalizált átalakulásokban.

Elsőként a szteroid-karbamátok szintézisét hajtottuk végre, majd Suzuki-Miyaura keresztkapcsolásba vittük azokat, Pd helyett Ni-alapú katalizátort használva. Hagyományos melegítéssel nem történt átalakulás, azonban mikrohullámú besugárzás hatására képződött a kívánt termék. A reakciómechanizmusra is tettünk javaslatot. Munkánk további részében a szteroid-karbamátokat mikrohullámú besugárzással C-H aktiválási reakciókba vittük. A besugárzás körülményeinek változtatásával elértük, hogy egy lépésben, tandem reakcióban megvalósítható legyen a C-H aktiválás és az irányító csoport eltávolítása is.

[1] C. C. C. J. Seechurn, M. O. Kitching, T. J. Colacot, V. Snieckus, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2012** (51) 5062–5085

[2] K. W. Quasdorf, M. Riener, K. V. Petrova, N. K. Garg, *J. Am. Chem. Soc.*, **2009** (131) 17748–17749

[3] K. W. Quasdorf, X. Tian, N. K. Garg, *J. Am. Chem. Soc.*, **2008** (130) 14422–14423

Köszönjük az ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAM, Nemzeti Felsőoktatási Kiválóság Ösztöndíj – Bolyai+ Felsőoktatási Fiatal Oktatói Kutatói Ösztöndíj ÚNKP-19-4-SZTE-71 „NEW NATIONAL EXCELLENCE PROGRAM OF THE MINISTRY OF HUMAN CAPACITIES”. This work was supported by National Research, Development and Innovation Office-NKFIH through projects OTKA SNN 124329.

KÖRNYEZETI KÉMIA SZEKCIÓ

N-METILAMINOSAVAK REAKCIÓJA HIPOKLÓROSSAVVAL: KINETIKA ÉS MECHANIZMUS

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

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

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

A hipoklórossav és az aminosavak közvetlen reakciójában N-klóraminosavak keletkeznek. A klóraminok kémiája két területen fontos. Egyrészt környezetkémiai szempontból a víztisztítás során játszanak jelentős szerepet, míg biológiai szempontból is kiemelkedőek. Ugyanis a hipoklórossavnak és a klóraminoknak meghatározó funkciója van a szervezet gyulladásokkal szembeni védelmében [1,2,3].

Az irodalomban viszonylag kevés biztos eredményt találunk az N-klóraminosavak képződésével és bomlásával kapcsolatban. Ezért korábbi kutatásaink során 17 fehérjealkotó aminosav hipoklórossavval lejátszódó reakciójában részletes képződés-kinetikai vizsgálatokat végeztünk. A gyorsan képződő klóraminok egy viszonylag lassú folyamatban elbomlanak. Részletes kinetikai vizsgálatokat végeztünk az α -alaninból, illetve az elágazó láncú aminosavakból keletkező N-klóraminosavak bomlására vonatkozóan és a folyamat során keletkező termékeket is azonosítottuk.

Az N-klórozott elágazó láncú aminosavak bomlása az N-klór- α -alaninnal összehasonlítva eltérő kinetikai sajátosságokat mutat és a különbség minden bizonnyal az eltérő α -alkil-szubsztituenseknek köszönhető. Ezért érdekes kérdés, hogy az aminocsoporton lévő egyik hidrogén közvetlen helyettesítése egy alkil-csoporttal, hogyan befolyásolja ezen reakciók lefutását. Vizsgálataink fő célja, hogy részletesen tanulmányozzuk a hipoklórossav és az N-metil-szubsztituált aminosavak közötti reakciók kinetikáját és mechanizmusát, valamint az eredményeket összehasonlítsuk a megfelelő fehérjealkotó aminosavakkal lejátszódó reakciók eredményeivel.

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

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

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

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

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

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.



A publikáció, illetve az annak keretében ismertett tudományos eredmény a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Richter Gedeon Talentum Alapítvány (székhely: 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.) támogatásával, „Richter Gedeon PhD Ösztöndíj” keretében készült.



RICHTER GEDEON

N-KLÓRAMINOK BOMLÁSKINETIKÁJA

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

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

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

A klóraminok kémiája két területen különösen fontos. Egyrészt a víztisztítás során alkalmazott klór és hipoklórossav a vízben levő ammóniával és szerves aminokkal reakcióba lép és így *N*-klóraminok képződnek. A klóraminok másodlagos fertőtlenítőszerként képesek a mikroorganizmusok és a baktériumok elpusztítására. Másrészt a klóraminok biológiai szempontból is jelentősek. A szervezetünkben lévő hidrogén-peroxid és kloridion reakciójában hipoklórossav képződik, ami erőlyes oxidálószerként képes reagálni a fehérjékkel, illetve aminosavakkal, így a klóraminok az élő szervezetben is megjelennek [1,2]. Ezen okok miatt fontosnak tartjuk a klóraminok bomlásának részletes kinetikai vizsgálatát. Korábban már több kutatócsoport, köztük a mi kutatócsoportunk is számos klóramin bomláskinetikáját tanulmányozta, azonban a jelenleg vizsgált *N*-klóretilamin és *N*-klórpropilamin bomláskinetikájára nem találtunk eredményeket az irodalomban.

Munkánk során a bomláskinetika követésére spektrofotometriás és ¹H NMR méréseket végeztünk. Semleges körülmények között ¹H NMR mérések segítségével követtük a klóraminok bomlását, azonosítottuk az acetonitrilt és az acetaldehidet, mint a folyamatok végtermékei. A kinetikai és az NMR vizsgálatok eredményei alapján megállapítottuk, hogy az *N*-klóretilamin bomlása két reakcióúton megy végbe. Az egyik folyamat egy másodrendű reakció (*k*₁), ami során két *N*-klóretilaminból *N,N*-diklóretilamin, illetve *N*-klóretánimin intermediereken keresztül acetonitril képződik. A másik reakcióút az aminosavakból képződő *N*-klóraminosavakra jellemző, elsőrendű folyamat (*k*₂), amiben az acetaldehid a végtermék.

A pH-függő vizsgálatok alapján megállapítottuk, hogy semleges, enyhén lúgos közegben viszonylag stabilak a klóramin oldatok, azonban a pH növelésével egyre gyorsabbá válik a bomlásuk és a spektrális változás is eltér a semleges közegben mért változástól. Lúgos körülmények között az abszorpciós maximumon kapott kinetikai görbék egyszerű egy exponenciális tagot tartalmazó összefüggéssel jól illeszthetők, azaz a folyamat elsőrendű.

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

[2] T. Dokter, Formation of NCl₃ and N₂O in the reaction of NaOCl and nitrogen compounds, *Journal of Hazardous Materials*, (**1985**), 12, 207-224.

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

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

A FELÜLETI STABILIZÁCIÓ MECHANIZMÁNAK SZEREPE AZ EZÜST NANORÉSZECSKÉK AGGREGÁCIÓS VISELKEDÉSÉRE BIORELEVÁNS KÖRÜLMÉNYEK KÖZÖTT

Bélteky Péter^a, Zakupszky Dalma^a, Boka Eszter^a, Rónavári Andrea^a, Kónya Zoltán^{a,b}

^aSzegedi Tudományegyetem, Interdiszciplináris Kiválósági Központ, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^bMTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Az ezüst nanorészecskék (AgNP) az egyik legelterjedtebben kutatott nanoszerkezetek a kiváló biológiai aktivitásuknak köszönhetően. Kutatásaink során a nanorészecskék kolloidális stabilitásának hatását vizsgáltuk ezen előnyös tulajdonság tükrében. Az élő szervezetekben jelenlévő változatos pH, illetve elektrolit-, és biomolekula koncentrációk mind jelentősen befolyásolják a részecskék aggregációs viselkedését, ami a nagy fajlagos felület elvesztése mellett a toxicitásukat is csökkenti [1]. Az aggregáció gátlását a részecskék megfelelő felületi borításával érhetjük el, amelynek a mechanizmusa alapulhat elektrosztatikai tasztáción, sztérikus kölcsönhatásokon, van ezek kombinációjának révén elektrosztérikus interakciókon.

Munkánk során 10 nm körüli nanorészecskéket szintetizáltunk olyan módon, hogy mindhárom stabilizáló mechanizmusra modell rendszert hozunk létre. Az elektrosztatikus stabilizálást citrát csoportokkal (AgNP@C), a sztérikus polivinil-pirrolidonnal (AgNP@PVP), az elektrosztérikus pedig zöld tea kivonattal (AgNP@GT) modelleztük, az aggregációs viselkedésüket pedig UV-Vis spektroszkópia és dinamikus fényszórásmérés (DLS) segítségével követtük 24 órán keresztül olyan körülmények között, amelyek jellemzők a biológiai rendszerekre.

Eredményeink alapján az elektrosztatikai stabilizálás önmában nem elegendő a részecskék kolloidális stabilitásának fenntartásához, ellenben a tisztán sztérikus hatások mellett nem elhanyagolható a nanorészecskék kémiai degradációja. Az elektrosztérikus rendszerben látszólag egyesül a két előző módszer előnye, azonban mindezek mellett az eredményeink arra utalnak, hogy élő szervezetekben a kialakuló biomolekuláris koronák határozzák meg az *in vivo* kémiai és kolloidális részecskestabilitást.

[1] P. Bélteky, A. Rónavári, N. Igaz, B. Szerencsés, I. Y. Tóth, I. Pfeiffer, M. Kiricsi, Z. Kónya *International Journal of Nanomedicine*, **2019** (14) 667-687.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-4-SZTE-580 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphól finanszírozott szakmai támogatásával készült.

ELEKTROKATALIZÁTOR ELŐÁLLÍTÁSA ATOMI RÉTEGLEVÁLASZTÁSOS MÓDSZERREL

Ballai Gergő^a, Gyenes Tamás^a, Haspel Henrik^b, Kukovecz Ákos^a, Kónya Zoltán^{a,c}

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

^b King Abdullah University of Science and Technology, KAUST Catalysis Center, Advanced Catalytic Materials, Thuwal 23955, Saudi Arabia

^cMTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémi Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

A tüzelőanyag-cellák az utóbbi időben a kutatások keresttüzébe kerültek, mint lehetséges alternatívái a hagyományos tüzelőanyagoknak. Különösen igaz ez a direkt folyadékos tüzelőanyag (Direct Liquid Fuel Cell/ DLFC) cellák esetén, melyek a könnyebben kezelhető és biztonságosabb tüzelőanyagnak, a kis méretüknek és az alacsony működési hőmérsékletüknek köszönhetően egyre szélesebb körben terjednek el. A tüzelőanyag cellákban használt katalizátor szubsztrátra való felvitele megvalósulhat több módon is. Ilyen módszer lehet az egyéb módon szintetizált nanorészecske felvitele aeroszol formájában, a só formájában felvitt katalizátor kiredukálása vagy az atomi rétegleválasztás. Kutatásunk során mi ezek közül az atomi rétegleválasztásos módszert (Atomic Layer Deposition/ ALD) használtuk mellyel szabályozhatóan, egyszerűen és gyorsan hozhatók létre vékony rétegek vagy nanorészecskék a szubsztrát felületén.

A munkánk során platina és platina/titanát katalizátorokat állítottunk elő a tüzelőanyag cellákban gáz diffúziós réteggént alkalmazott szénpapír felületére. Az így szintetizált elektródokat pásztázó és transzmissziós elektronmikroszkópos, illetve röntgen diffraktometriás módszerrel karakterizáltuk. A katalizátorok elektrokémiai aktivitását is vizsgáltuk különböző reakciókban, például a metanol és a hangyasav oxidációs reakcióiban.

Azt tapasztaltuk, hogy a titán-dioxid jelentősen hat a platina részecskeméretére, az elektrokémiai aktív felületre és potenciálisan a szénmonoxid általi mérgeződést is csökkentheti. Az általunk előállított katalizátor olcsóbb alternatívája lehet a piacon elterjedt platina/ruténium ötvözetből készült katalizátoroknak.

UV-POWER LED ALKALMAZÁSA HETEROGÉN FOTOKATALÍZIS SORÁN - REAKTORTERVEZÉS, ÉPÍTÉS ÉS TESZTELÉS

Náfrádi Máté, Hlogyik Tamás, Alapi Tünde

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Szeged, Dóm tér 7.

A nagyhatékonyságú oxidációs eljárásokon alapuló kiegészítő víztisztítási módszerek gyakran UV fény alkalmazását igénylik. Intenzív fejlesztésüknek és számos kedvező tulajdonságuknak köszönhetően, napjainkra az UV tartományban sugárzó LED fényforrások jó alternatívát nyújtanak a higanygőzlámpák, mint UV fényforrások helyettesítésére. Munkánk során UV Power-LED fényforrásokkal működő fotoreaktort terveztünk, építettünk és teszteltünk.

A fotoreaktor 12 db 367 nm-en sugárzó UV Power-LED-del szereltük fel. A LED-ek optimális működésének megfelelő hőmérsékletet hűtőelemekkel biztosítottuk. Az elrendezés lehetővé tette a fényforrás és a reaktor fala közti távolság változtatását is. A LED-ek által kibocsátott fotonfluxust az áramerősség változtatásával, ezen keresztül pedig a betáplált elektromos teljesítménnyel szabályoztuk.

A fényforrások foton fluxusának meghatározása vas-oxalát aktinometriával történt. Az áramerősség, illetve a betáplált elektromos teljesítmény függvényében a kibocsátott fotonok fluxusa lineárisan változott. Kumarin segítségével meghatároztuk a hidroxilgyök képződési sebességének a foton fluxustól való függését állandó TiO_2 fotokatalizátor koncentráció mellett. A kapott eredményeket összehasonlítottuk a 300-400 nm tartományban sugárzó higanygőzlámpa alkalmazása során kapott eredményekkel. A LED fényforrásokkal működő fotoreaktor esetén közel azonos elektromos teljesítmény mellett mind a kumarin átalakulási sebessége, mind a hidroxilgyökkel való reakcióban képződő umbelliferon képződési sebessége jelentősen meghaladta a higanygőzlámpa alkalmazása során mért értékeket. Ugyanakkor a látszólagos kvantumhasznosítási tényezőket összevetve a két fényforrás alkalmazása közti különbség nem volt számottevő. A két fényforrást teszteltük szulfametoxipiridazin, egy általánosan használt antibiotikum hatóanyag átalakításában is, mely során hasonló eredményeket értünk el.

Alapi Tünde köszöni a Bolyai János kutatói ösztöndíj támogatását.

A publikáció az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-2-SZTE-409, ÚNKP-20-3 -SZTE-548 és ÚNKP-20-5-SZTE-639 számú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphól finanszírozott szakmai támogatásával készült.

A szerzők köszönik az NKFI FK132742 számú OTKA projekt támogatását.

VÁKUUM-ULTRAIBOLYA TARTOMÁNYBAN SUGÁRZÓ FÉNYFORRÁSOK HATÉKONYSÁGÁNAK ÖSSZEHASONLÍTÁSA ANTIBIOTIKUM HATÓANYAGOK ÁTALAKÍTÁSA SORÁN

Farkas Luca, Varga Virág, Alapi Tünde

Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged, Dóm tér 7.

A hagyományos biológiai víztisztítás gyakran nem alkalmas a kiskoncentrációban jelenlévő biológiailag aktív szerves szennyezők, többek között a gyógyszermaradványok eltávolítására, így azok egyre gyakrabban kimutathatók felszíni vizeinkben. Ennek következtében az élő szervezetek gyógyszerterhelése a vízen keresztül (akár élővízként akár ivóvízbázisként gondolunk rá) folyamatossá válhat. Napjainkban számos egészségügyi probléma (funkcionális meddőség, vagy a daganatos és immunrendszeri problémákra visszavezethető betegségekkel küzdők számának drasztikus növekedése) egyik feltételezett oka a szervezetünket érő folyamatos gyógyszerterhelés. A hagyományos víztisztítási eljárások mellé ezért kiemelten fontos olyan utókezelések kidolgozása és fejlesztése, amelyek képesek a biológiai tisztítás után megmaradó, kis koncentrációjú, biológiailag aktív vegyületek maradéktalan eltávolítására.

A kísérleti munkánk során kétféle, a VUV tartományban sugárzó fényforrás alkalmazhatóságát vizsgáltuk és hasonlítottuk össze a szulfonamidok közé tartozó antibiotikum hatóanyagok vizes oldatból való eltávolítása szempontjából. Az egyik fényforrás a nagytisztaságú víz előállítására is használt 254 és 185 nm-en sugárzó kisnyomású higanygőzlámpa, míg a másik az egyetlen kereskedelmi forgalomban kapható VUV tartományban sugárzó excimer lámpa, a Xenon-excimer lámpa volt, mely 172 nm-en sugároz. Vizsgáltuk és összehasonlítottuk a két fényforrás használata során az egyes hatóanyagok átalakulási sebességét, valamint azok négykomponensű oldatai esetén azok egymásra gyakorolt hatását. Három különböző mátrixnak a szerves anyagok átalakulási sebességre kifejtett hatását hasonlítottuk össze mindkét fényforrás esetén, melyek a csapvíz, fordított ozmózissal tisztított ipari szennyvíz, valamint biológiailag tisztított lakossági szennyvíz voltak. Emellett összehasonlítottuk minden esetben a kiindulási vegyületek 90%-os átalakulásához szükséges befektetett elektromos energiát is.

Alapi Tünde köszöni a Bolyai János kutatói ösztöndíj támogatását.

A publikáció az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-3-SZTE-459 és ÚNKP-20-5-SZTE-639 számú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphól finanszírozott szakmai támogatásával készült.

A szerzők köszönik az NKFI FK132742 számú OTKA projekt támogatását.

2020. ÉVI KÉMIAI ELŐADÓI NAPOKAT TÁMOGATTÁK

Magyar Kémikusok Egyesülete



Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoport



Szegedi Tudományegyetem

