

---

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

**XLIV.**  
**KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK**

*Programfüzet*



Szegedi Tudományegyetem  
Szeged, 2021. október 26-27.

Szerkesztették:

*Karádi Krisztina*

*Kocsis Marianna*

SZTE TTIK Szerves Kémia Tanszék

*Takács Dóra*

*Vargáné Árok Zsófia*

SZTE TTIK Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

**A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE**  
**ÁLTAL A 2021. ÉVBEN NÍVÓDÍJJAL KITÜNTETETT**  
**DIPLOMADOLGOZATOK**

## **BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM**

*DARGÓ GYULA:* Királis (tio)négyszetamid organokatalizátorok előállítása és alkalmazása sztereoszelektív reakciókban

*DOMAHIDY FARKAS LÁSZLÓ:* Feltételesen fotolabilis vegyületek szintézise és vizsgálata

## **DEBRECENI EGYETEM**

*PAPP VANDA:* Ca(II)-alginát aerogél hidratációs mechanizmusa

*PESTI ANNA:* Kapilláris elektroforézissel kapcsolt tömegspektrometriás módszer kidolgozása artemizinin meghatározására

## **EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM**

*BALÓ TÍMEA:* Synthesis of Pharmacologically Active Kinase Inhibitors

*CSOMOS ATTILA:* Design, Synthesis and Analysis of Novel Fluorescent Probes for Two- Photon Zinc Imaging

*KERN DÓRA:* Vörös tartományban emittáló, hatékonyan fluorogén vegyületek előállítása

## **PANNON EGYETEM**

*ŐZE CSILLA:* Cement kiegészítőanyagok hatása a cementpép kémiai ellenálló képességére

*TÖRÖK PATRIK:* Nem-hem-vastartalmú modellek előállítása és gyakorlati alkalmazásai

## **PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM**

*PATYI GÁBOR:* Lipopeptidek vizsgálata CE-MS módszerrel vízmentes közegben

## **MISKOLCI EGYETEM**

*PECSMÁNY DÁNIEL JÁNOS:* Poliuretán habképződés virtuális és ipari optimalizációja

## **SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM**

*NOVÁK TIBOR TAMÁS:* Új fluorozott ciklusos építőelemek szintézise halofluorozással és rokon reakciókkal

*PAPP PASZKÁL:* Kémiai reakció és a közegmozgás kölcsönhatásának modellezése szilárd–folyadék rendszerben

# ÁTTEKINTŐ PROGRAM

# **XLIV. KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK**

**2021. október 26–27.**

**2021. október 26. kedd**

*Helyszín: Online*

**08.00** - Regisztráció

**08.30 - 9.00** 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

**Simonné Dr. Sarkadi Livia**  
A Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke

**09.00 - 10.00** Plenáris előadás

*Előadó: Dr. Josep Puigmartí-Luis*, *professor*  
*University of Barcelona (UB),*  
*Department of Materials Science and Physical Chemistry*

**10.00 - 10.15** Szünet

**10.15 - 11.45** Nívódíjas előadások szekciója I.

*Elnök: Dr. Kovács Lajos*, *tudományos főmunkatárs*

**11.45 - 12.00** Szünet

**12.00 - 13.30** Nívódíjas előadások szekciója II.

*Elnök: Dr. Ilisz István*, *egyetemi tanár*

**13.30 - 13.45** Szünet

**13.45 - 15.30** Analitikai kémia szekció

*Elnök: Dr. Galbács Gábor*, *egyetemi tanár*

**15.30 - 15.45** Szünet

**15.45 - 16.45** Szerves kémia szekció I.

*Elnök: Dr. Wölfling János*, *egyetemi tanár*

**16.45 - 17.00** Szünet

**17.00 - 18.00** Szeretlen és biokémia szekció

*Elnök: Dr. Gyurcsik Béla*, *egyetemi docens*

**2021. október 27. szerda**

*Helyszín: Online*

- 08.00 - 08.30 Kutatói karrierépítés és bifunkciós iminofoszorán szuperbázis katalízis**  
*Előadó: Rózsár Dániel, PhD hallgató*  
*University of Oxford, Department of Chemistry*
- 08.30 - 08.45 Szünet**
- 08.45 - 10.15 Szerves kémia szekció II.**  
*Elnök: Dr. Szöllősi György, tudományos tanácsadó*
- 10.15 - 10.30 Szünet**
- 10.30 - 12.30 English section**  
*Chairman: Dr. Janáky Csaba, associate professor*
- 12.30 - 12.45 Szünet**
- 12.45 - 14.00 Környezeti kémia szekció**  
*Elnök: Dr. Alapi Tünde, egyetemi docens*
- 14.00 - 14.15 Szünet**
- 14.15 - 15.45 Szerves kémia szekció III.**  
*Elnök: Dr. Frank Éva, egyetemi docens*
- 15.45 - 16.00 Szünet**
- 16.00 - 17.00 Anyagtudományi szekció**  
*Elnök: Dr. Kónya Zoltán, egyetemi tanár*

# RÉSZLETES PROGRAM



**2021. október 26. kedd**

*Helyszín: Online*

**08.00 – Regisztráció**

**08.30 – 09.00 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**

**Simonné Dr. Sarkadi Livia**,  
*A Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke*

**09.00 – 10.00 Plenáris előadás**

Exploiting controlled reaction-diffusion conditions for materials synthesis: Looking back...with a view to the future...

*Előadó: Dr. Josep Puigmartí-Luis, professor*  
*University of Barcelona (UB),*  
*Department of Materials Science and Physical Chemistry*

**10.00 – 10.15 Szünet**

**10.15 – 11.45 Nívódíjas előadások szekciója I.**

*Elnök: Dr. Kovács Lajos, tudományos főmunkatárs*

**10.15 – 10.30 Synthesis of Pharmacologically Active Kinase Inhibitors**

*Előadó: Baló Tímea Katalin*

**10.30 – 10.45 Design, Synthesis and Analysis of Novel Fluorescent Probes for Two- Photon Zinc Imaging**

*Előadó: Csomos Attila*

**10.45 – 11.00 Királis (tio)négyzetamidok előállítása és alkalmazása aszimmetrikus organokatalízisben**

*Előadó: Dargó Gyula*

**11.00 – 11.15 Feltételesen fotolabilis vegyületek szintézise és vizsgálata**

*Előadó: Domahidy Farkas*

**11.15 – 11.30 Új fluorozott építőelemek szintézise halofluorozással és rokon reakciókkal**

*Előadó: Dr. Novák Tibor Tamás*

**11.30 – 11.45 Cement kiegészítőanyagok hatása a cementpép kémiai ellenálló képességére**

*Előadó: Öze Csilla*

**11.45 – 12.00 Szünet**

**12.00 – 13.30 Nívódíjas előadások szekciója II.**

*Elnök: Dr. Ilisz István, egyetemi tanár*

**12.00 – 12.15 Kémiai reakció és a közegmozgás kölcsönhatásának modellezése szilárd-folyadék rendszerben**

*Előadó: Papp Paszkál*

- 12.15 – 12.30 Kalcium(II)- alginát aerogél hidratációs mechanizmusa  
*Előadó:* Papp Vanda
- 12.30 – 12.45 Lipopeptidek vizsgálata CE-MS módszerrel vízmentes közegben  
*Előadó:* Patyi Gábor
- 12.45 – 13.00 Poliuretán habképződés virtuális és ipari optimalizációja  
*Előadó:* Pecsmány Dániel
- 13.00 – 13.15 Kapillaris elektroforézissel kapcsolt tömegspektrometriás módszer kidolgozása artemizinin meghatározására  
*Előadó:* Pesti Anna
- 13.15 – 13.30 Nem-hem-vastartalmú modellek előállítása és gyakorlati alkalmazásai  
*Előadó:* Török Patrik
- 13.30 – 13.45 Szünet
- 13.45 – 15.30 **Analitikai kémia szekció**  
*Elnök: Dr. Galbács Gábor, egyetemi tanár*
- 13.45 – 14.00 Az extracelluláris vezikulák fehérje és lipid mennyiségének jelölésmentes meghatározása infravörös spektroszkópiával  
*Előadó:* Bebesi Tímea
- 14.00 – 14.15 Vatta-HILIC és grafit alapú szilárd fázisú extrakciós mintaelőkészítési módszerek glükózaminoglikánok tisztítására  
*Előadó:* Fügedi Kata Dorina
- 14.15 – 14.30 A bioekvivalencia előrejelzésére alkalmas módszerek összevetése aripiprazol tartalmú készítmények esetében  
*Előadó:* Kádár Szabina
- 14.30 – 14.45 Meloxicam szemcseméretének vizsgálata tablettákban gépi látási rendszerrel  
*Előadó:* Mészáros Lilla Alexandra
- 14.45 – 15.00 Az antimikrobiális anion alapú ionos folyadékok szintézise és hidratációs tulajdonságai  
*Előadó:* Cakó Bagány Nikolett
- 15.00 – 15.15 Karvedilol-ciklodextrin komplex kioldódás-felszívódás vizsgálata  
*Előadó:* Tözsér Petra
- 15.15 – 15.30 NMR dinamikai jelenségek ionos tenzidek vizes oldatában  
*Előadó:* Nyul Dávid
- 15.30 – 15.45 Szünet
- 15.45 – 16.45 **Szerves kémia szekció I.**  
*Elnök: Dr. Wölfling János, egyetemi tanár*
- 15.45 – 16.00 Eljárás Hantzsch-észter származékok előállítására  
*Előadó:* Demeter Adrienn Katalin
- 16.00 – 16.15 1,4-szubsztituált Hantzsch-észter (1,4-dihidropiridin) származékok oxidációja különböző oxidálószerrel  
*Előadó:* Bancsó Bettina

- 16.15 – 16.30** Hantzsch észterekből előállított piridínium származékok redukciós vizsgálata különböző redukálószerekkel  
*Előadó:* Bodonyi Simon József
- 16.30 – 16.45** Cinkona-tionégyzetamidok alkalmazása fémmel kombinált organokatalitikus reakciókban  
*Előadó:* Kis Dávid
- 16.45 – 17.00** Szünet
- 17.00 – 18.00** **Szervetlen és biokémia szekció**  
*Elnök:* **Dr. Gyurcsik Béla**, *egyetemi docens*
- 17.00 – 17.15** Rekombináns enzimek szelektív rögzítési lehetőségeinek vizsgálata  
*Előadó:* Alács Bálint
- 17.15 – 17.30** Monenzin A kölcsönhatása kétértékű fémionokkal  
*Előadó:* Hajdu Bálint
- 17.30 – 17.45** Egy vízoldható, rákellenes 8-hidroxi-kinolin-aminosav hibrid és félszendvics ródiium és ruténium komplexeinek vizsgálata  
*Előadó:* Kovács Hilda
- 17.45 – 18.00** Foszfín ligandumot tartalmazó oxorénium(V) és félszendvics RuCp-komplexek oldatkémiai vizsgálata  
*Előadó:* Mészáros János Péter

**2021. október 27. szerda**

*Helyszín: Online*

- 08.00 – 08.30** **Kutatói karrierépítés és bifunkciós iminofoszfórán szuperbázis katalízis**  
*Előadó: Rózsár Dániel, PhD hallgató*  
*University of Oxford, Department of Chemistry*
- 08.30 – 08.45** Szünet
- 08.45 – 10.15** **Szerves kémia szekció II.**  
*Elnök: Dr. Szöllősi György, tudományos tanácsadó*
- 08.45 – 09.00** Poli(etilén-tereftalát) lebontásának optimalizálása szilárd hordozóhoz rögzített organokatalizátorok alkalmazásával  
*Előadó: Kiss Johanna*
- 09.00 – 09.15** Lipofil cinkona organokatalizátor előállítás, alkalmazása és visszaforgatása  
*Előadó: Molnár Balázs*
- 09.15 – 09.30** Funkcionalizált, gyűrűs alkilamino-karbének (CAAC) ruténiumkomplexei olefinek metatézisében  
*Előadó: Nagyházi Márton*
- 09.30 – 09.45** Fémionkelátor fluoreszcens szenzormolekulák szintézise  
*Előadó: Pantl Orsolya*
- 09.45 – 10.00** Az Uhle-ke-ton, egy ergot alkaloid lehetséges, új szintézise  
*Előadó: Szabó Dávid*
- 10.00 – 10.15** Elemi kén alkalmazása multikomponensű reakciókban  
*Előadó: Szabó Renáta*
- 10.15 – 10.30** Szünet
- 10.30 – 12.30** **English section**  
*Chairman: Dr Janáky Csaba, associate professor*
- 10.30 – 10.45** Stabilization and flocculation properties of the colloidal system containing alginic acid and kaolinite  
*Presenter: Ewelina Godek*
- 10.45 – 11.00** The synthesis of calcium phosphate based materials for environmental and biomedical purposes using eggshells  
*Presenter: Marta Kalbarczyk*
- 11.00 – 11.15** Investigation of a LED-UV/ClO<sub>2</sub> system applied to the degradation of phenol in water  
*Presenter: Daniele Scheres Firak*
- 11.15 – 11.30** Biocompatible and biodegradable aliphatic polyester for drug delivery application  
*Presenter: Mohamed M. Abdelghafour*
- 11.30 – 11.45** Ionic strength dependent intermolecular structure alteration of a HPAM polymer used in enhanced oil recovery  
*Presenter: Vargáné Arok Zsófia*
- 11.45 – 12.00** Development of an antioxidant hybrid catalyst  
*Presenter: Bere Katalin Viktória*

- 12.00 – 12.15 Electrochemical performances of anatase TiO<sub>2</sub> nanotube arrays electrode in ionic liquid electrolyte through functionalization of additive for electrode protection  
*Presenter: Aleksandra Roganović*
- 12.15 – 12.30 Synthesis and characterization of Nuclear Factor I, a potential metal ion binding protein  
*Presenter: Zeyad H. A. Nafae*
- 12.30 – 12.45 Szünet
- 12.45 – 14.00 **Környezeti kémia szekció**  
*Elnök: Dr. Alapi Tünde, egyetemi docens*
- 12.45 – 13.00 Nagy metán hozamú tervezett nanokatalizátorok nagynyomású CO<sub>2</sub> átalakítási reakcióban  
*Előadó: Bali Henrik*
- 13.00 – 13.15 Fotokatalizátor előállítása atomi rétegleválasztásos módszerrel  
*Előadó: Ballai Gergő*
- 13.15 – 13.30 Nagyhatékonyságú oxidációs eljárások alkalmazása a trimetoprim és az 5-fluorouracil vizes oldatainak kezelésére  
*Előadó: Covic Anett*
- 13.30 – 13.45 Kísérleti paraméterek hatása a szén-dioxid elektrolizáló cellák hosszútávú működésére  
*Előadó: Samu Angelika Anita*
- 13.45 – 14.00 Ni-lal adalékolt, különböző szerkezetű Ce-oxid katalizátorok működésének vizsgálata CO<sub>2</sub> redukciós reakcióban  
*Előadó: Szamosvölgyi Ákos*
- 14.00 – 14.15 Szünet
- 14.15 – 15.45 **Szerves kémia szekció III.**  
*Elnök: Dr. Frank Éva, egyetemi docens*
- 14.15 – 14.30 Karbopironin alapvázal rendelkező fluoreszcens festékek szintézise  
*Előadó: Ágoston Henrietta*
- 14.30 – 14.45 Diketonáto-szilol komplexek előállítása és analitikai vizsgálata  
*Előadó: Szathmári Balázs*
- 14.45 – 15.00 Chan-Lam kapcsolások 13 $\alpha$ -ösztrom sorban  
*Előadó: Traj Péter*
- 15.00 – 15.15 Optikailag aktív H-foszfinátok előállításának és felhasználásának vizsgálata  
*Előadó: Varga Bence*
- 15.15 – 15.30 Kovalensen rögzíthető heterociklusos koronaéterek optokémiai Pb<sup>2+</sup> szenzor fejlesztéséhez  
*Előadó: Vezse Panna*
- 15.30 – 15.45 Szubsztituens-hatások foszfa-Michael-addícióban: számításon kémiai vizsgálatok  
*Előadó: Fekete Csilla*
- 15.45 – 16.00 Szünet

- 16.00 – 17.00** **Anyagtudományi szekció**  
*Elnök: Dr. Kónya Zoltán, egyetemi tanár*
- 16.00 – 16.15** Perovszkit szerkezetű BaTiO<sub>3</sub> és ZnTiO<sub>3</sub> mechanokémiai előállítása  
*Előadó: Berkesi Dániel Simon*
- 16.15 – 16.30** Biodegradábilis kereszt kötött polimerek viselkedése vizes közegben  
*Előadó: Papp Vanda*
- 16.30 – 16.45** Polimer aerogélek előállítása és gázseparációs alkalmazásuk  
*Előadó: Pércsi Dániel*
- 16.45 – 17.00** Dinamikus Schiff-bázis kötések alapuló, öngyógyító tulajdonságokkal rendelkező polivinil-alkohol  
*Előadó: Takács Tamás*

# **PLENÁRIS ELŐADÁS I.**

# EXPLOITING CONTROLLED REACTION-DIFFUSION CONDITIONS FOR MATERIALS SYNTHESIS: LOOKING BACK... WITH A VIEW TO THE FUTURE

**Josep Puigmartí-Luis**<sup>a,b</sup>

*<sup>a</sup>Department de Ciència dels Materials i Química Física, Institut de Química Teòrica i Computacional, 08028  
Barcelona, Spain*

*<sup>b</sup>ICREA, Pg. Lluís Companys 23, 08010 Barcelona, Spain*

Self-assembly has long been used to control covalent and non-covalent interactions where molecular design has been the major driving force to achieve a desired outcome. Like in nature, a full control over self-assembly processes could lead to rationalized structure-property correlations, a long-time sought in chemistry, physics and materials science. However, the pathways followed and the mechanisms underlying the formation of supramolecular aggregates are still largely unknown and unresolved. Accordingly, the elucidation of nucleation and growth mechanisms will be highly required to push supramolecular chemistry to the next level, where access to nature inspired functions will be accomplished. In this contribution, I will present how reaction-diffusion (RD) conditions established within microfluidic devices can be used to uncover pathway complexity as well as to trigger pathway selection. Specifically, I will show that microfluidic RD conditions provide an unprecedented kinetic control over self-assembly processes; for example, enabling the isolation of well-defined kinetically trapped states as well as unprecedented metastable intermediates. This research provides a new tool to study and understand supramolecular chemistry, and opens up new avenues for the engineering of advanced functional assemblies and systems.



# **NÍVÓDÍJAS ELŐADÁSOK SZEKCIÓJA I.**

# SYNTHESIS OF PHARMACOLOGICALLY ACTIVE KINASE INHIBITORS

**Tímea Baló<sup>a,b</sup>, Attila Sápi<sup>a</sup>, Zoltán Novák<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Servier Research Institute of Medicinal Chemistry, 1031 Budapest, Záhony u. 7*

<sup>b</sup>*Eötvös University, Faculty of Science, Institute of Chemistry, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A*

Heteroaromatic compounds are commonly used in medicinal research, since their chemistry is well documented, materials are easily accessible and heteroatoms often serve as interaction sites with proteins [1]. Thieno[2,3-c]pyridine derivatives seemed as a good starting point to develop GRK2 kinase inhibitors in order to treat heart failure progression caused by nutritional overload [2].

To obtain a possible lead compound we docked several molecules (based on hits) and designed some series to synthesize and optimize. To achieve this we tried different substituents at different positions and we studied the effect of functional groups on the activity and efficiency. Compounds based on other scaffolds were also prepared.

Potential inhibitor candidates consist of a hinge binder moiety (in this case this is mainly the thieno[2,3-c]pyridine scaffold), which interacts with ATP pocket of the protein, a linker moiety, and an aromatic, hydrophobic amine compound, to provide further interactions and selectivity over the other GRK isoforms and further kinases.

We also wanted to establish synthetic routes to obtain novel, functionalized thieno[2,3-c]pyridine derivatives, so we carried out transition metal catalysed cross couplings, electrophile substitutions and even radical reaction.

During this work, we managed to synthesize a series of potential inhibitors and based on pharmaceutical results we modified the structure to obtain the most possible effective substance in the hit to lead phase of the research project. Both activity and efficiency were optimised.

Furthermore, we synthesized thieno[2,3-c]pyridine derivatives, which were unpublished up to now, and these compounds provide the possibility to construct the molecule further in a research project.

[1] A. K. Ghose, T. Herbertz, D. A. Pippin, J. M. Salvino, J. P. Mallamo; *Journal of Medicinal Chemistry*, **2008** 51(17) 5149–5171.

[2] E. Lucas, M. Cruces-Sande, A. M. Briones, M. Salices, F. Mayor, C. Murga, R. Vila-Bedmar; *Archives of Physiology and Biochemistry*, **2015** 121(5) 163–177.

**I would like to express my sincere thanks to my supervisors and all the workers of SRIMC who contributed to the success of this work.**

# DESIGN, SYNTHESIS AND ANALYSIS OF NOVEL FLUORESCENT PROBES FOR TWO-PHOTON ZINC IMAGING

**Csomos Attila<sup>a,b</sup>, Kovács Ervin<sup>a,c</sup>, Dunkel Petra<sup>d</sup>, Fülöp Anna<sup>a</sup>, Katona Gergely<sup>e</sup>,  
Rózsa Balázs József<sup>f</sup>, Mucsi Zoltán<sup>a,g</sup>**

<sup>a</sup>*Femtonics Ltd. Department of Chemistry, H-1094 Bp, Tűzoltó street 59.*

<sup>b</sup>*Eötvös Loránd University, Hevesy György PhD School of Chemistry, H-1117 Bp, Pázmány Péter stny. 1/A*  
<sup>c</sup>*Polymer Chemistry Research Group, Research Centre for Natural Sciences, H-1117 Bp, Magyar tudósok krt. 2.*

<sup>d</sup>*Semmelweis University, Department of Organic Chemistry, H-1092 Budapest Hőgyes Endre street 7.*

<sup>e</sup>*Two-Photon Measurement Technology Research Group, Faculty of Information Technology and Bionics,  
Pázmány Péter Catholic University, H-1083 Bp, Práter street 50/A.*

<sup>f</sup>*Laboratory of 3D Functional Imaging of Neuronal Networks and Dendritic Integration, Institute of  
Experimental Medicine, H-1083 Bp, Szigony street 43.*

<sup>g</sup>*Faculty of Materials Science and Engineering, University of Miskolc, H-3515 Miskolc, Egyetem út 1.*

The importance of Zn<sup>2+</sup> ions in biology cannot be questioned, as they play crucial roles in cellular processes, neurobiology, moreover in different diseases such as COVID-19, or Alzheimer's. [1–3]. Fluorescent microscopy is a popular method for the detection of metal ions in biological samples, especially two-photon microscopy carries several advantages [4]. However, all these techniques require the use of selective fluorescent chemosensors for the desired analyte. The commercial availability of fluorescent probes for Zn<sup>2+</sup> is poor, moreover, the selection of sensors usable in two-photon microscopy is especially scarce.

This work presents the design and synthesis of Zn<sup>2+</sup> selective, two-photon active fluorescent probes. A panel of quinolines and dipicolyl amine derivatives were designed inspired by the chromophore of the green fluorescent protein [5]. Presence of Zn<sup>2+</sup> ions trigger a significant fluorescent enhancement of the presented probes. The complex formation of the probes is selective for Zn<sup>2+</sup>, while the dissociation constants of the complexes cover a range from the nM concentrations to mM concentrations rendering our probes usable in microscopy. This work presents the characterization of the probes under two-photon excitation and demonstrates a possible biological application as well.

[1]W. Maret, *Adv. Nutr.* **2013**, *4*, 82–91.

[2]B. Czaplinska, E. Spaczynska, R. Musiol, *Med. Chem. (Los. Angeles)*. **2018**, *14*, 19–33.

[3]A. Mayor-Ibarguren, C. Busca-Arenzana, Á. Robles-Marhuenda, *Front. Immunol.* **2020**, *11*, 1–8.

[4]R. K. P. Benninger, D. W. Piston, *Curr. Protoc. cell Biol.* **2013**, *Chapter 4*, Unit-4.11.24.

[5]A. Jancsó, E. Kovács, L. Cseri, B. J. Rózsa, G. Galbács, I. G. Csizmadia, Z. Mucsi, *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* **2019**, *218*, 161–170.

# KIRÁLIS (TIO)NÉGYZETAMIDOK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS ALKALMAZÁSA ASZIMMETRIKUS ORGANOKATALÍZISBEN

**Dargó Gyula<sup>a</sup>, Kis Dávid<sup>a</sup>, Nagy Sándor<sup>a</sup>, Mátravölgyi Béla<sup>a</sup>, Huszthy Péter<sup>a</sup>, Kupai József<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Szent Gellért tér 4*

A modern vegyiparban kulcsfontosságú szerepe van a katalitikus folyamatoknak. A katalizátorok előállítás, fejlesztése és alkalmazása nemcsak gazdasági, hanem környezetvédelmi szempontból is kiemelkedő jelentőséggel bír. A katalizátorok alkalmazásával nagyobb termelés mellett szelektíven állíthatjuk elő a kívánt vegyületeket. A katalitikus reakciók közül kiemelkedően fontosak a sztereoszelektív szintézisek, melyek megvalósítását az aszimmetrikus organokatalízis nagymértékben elősegítette. Ennek nyilvánvaló jelentőségét elismerve a kifejlesztéséért 2021-ben a kémiai Nobel-díjat Benjamin Listnek és David W. C. MacMillannek adományozták.

Kutatómunkám során én is ehhez a törekvéshez csatlakozva több királis négyzetamid, illetve tionégyzetamid organokatalizátort állítottam elő, amelyek katalitikus aktivitását aszimmetrikus reakciókban tanulmányoztam. A katalizátorok királis egységének kialakításához a természetből enantiomertisztán izolálható aminosavat, az L-prolint, valamint a cinkona alkaloidok családjába tartozó kinint választottam. Az előállított aszimmetrikus cinkona-prolinalapú organokatalizátorok katalitikus aktivitását aszimmetrikus *Michael*-addícióban vizsgáltam  $\beta$ -nitrosztirol és acetilaceton reakciójában. A benzil-prolin-négyzetamidokat, illetve -tionégyzetamidokat az antracénacetaldehid és *transz*- $\beta$ -nitrosztirol *Diels–Alder*-cikloaddícióban, valamint a hennotánsav és egy  $\beta,\gamma$ -telítetlen  $\alpha$ -keto észter konjugált addíciós reakciójában alkalmaztam.

**A szerzők köszönik a Nemzeti Kutatási és Fejlesztési és Innovációs Hivatal (nyilvántartási számok OTKA-FK138037 és K128473), és a Richter Gedeon Kiválósági PhD Ösztöndíj (Richter Gedeon Talentum Alapítvány) anyagi támogatását.**

# FELTÉTELESEN FOTOLABILIS VEGYÜLETEK SZINTÉZISE ÉS VIZSGÁLATA

**Domahidy Farkas<sup>a</sup>, Bojtár Márton<sup>a</sup>, Kele Péter<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.*

Az élő szervezetek fénnel történő manipulálása lehetővé teszi a biológiai rendszerekbe történő noninvaszív, térben és időben jól szabályozható beavatkozást. Ennek egyik eszköze a fotolabilis védőcsoportok (photocage-ek) alkalmazása, amelyek besugárzás hatására képesek egy kötés hasításával felszabadítani a hozzájuk kötött hatóanyag szabad, aktív formáját.

A tetrazin csoport fluoreszcencia-kioldó tulajdonságát sikerrel alkalmazták számos olyan turn-on fluorogén jelzővegyületben, amelyek a tetrazin funkció bioortogonális click reakcióval (iEDDA) történő megszüntetése révén válnak fluoreszcenssé [1]. Ezek mintájára feltételezhető volt, hogy egy fotolabilis védőcsoportot tetrazinnal konjugálva olyan vegyülethez juthatunk, amely önmagában fotostabil, azonban egy bioortogonális reakcióval fotolabilissé tehető. A koncepció magában hordozza annak a lehetőségét, hogy a click reakcióban részt vevő másik reaktánst megfelelő célzó vegyülethez (pl. biomolekulához vagy akár antitesthez) kötve a védőcsoportot szelektíven lehessen eltávolítani egyes sejtekben vagy organellumokban besugárzás segítségével, felszabadítva a hozzá kötött gyógyszerhatóanyagot vagy egyéb kismolekulát. A módszer reményeink szerint a fotoaktivált kemoterápiában (PACT) találhat alkalmazásra.

Kutatómunkám során előállítottam a dietilaminokumarin (DEAC) fotolabilis védőcsoport tetrazinnal konjugált származékát, majd ehhez különböző (észter-, karbonát-, és karbamát-) csoportokon keresztül UV-aktív modellvegyületeket kötöttem. A célvegyületek látható (kék) fénnel végzett fotolízisét HPLC mérésekkel nyomon követve igazoltam az előállított vegyületek feltételes fotolabilitását, illetve vizsgáltam a távozó csoport és az oldószer hatását a reakció kinetikájára. Szintetizáltam és hasonlóan jellemeztem továbbá egy olyan vegyületet, amelyben a kumarin photocage-hez egy fluorogén jelzővegyület kapcsolódik, így alkalmas a feltételes fotolízis fluoreszcens mikroszkópiával történő in vivo vizsgálatára [2].

[1] J. C. T. Carlson, L. G. Meimetis, S. A. Hilderbrand, R. Weissleder; *Angewandte Chemie International Edition*, **2013** (52) 6917-6920

[2] M. Bojtár, K. Németh, F. Domahidy, G. Knorr, A. Verkman, M. Kállay, P. Kele, *Journal of the American Chemical Society*, **2020** (142) 15164-15171

# ÚJ FLUOROZOTT CIKLUSOS ÉPÍTŐELEMELK SZINTÉZISE HALOFLUOROZÁSSAL ÉS ROKON REAKCIÓKKAL

**Novák Tibor Tamás<sup>a</sup>, Kiss Loránd<sup>a</sup>, Remete Attila Márió<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Szegedi Tudományegyetem Gyógyszerésztudományi Kar Gyógyszerkémiai Intézet, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.*

A fluoratom a hidrogénhez hasonló méretű, de jóval elektronegatívabb. A C-F kötés erősebb a C-H kötésnél, és poláris hidrofób jellegű. Ezek miatt a fluor beépítése egy molekulába nagymértékben módosíthatja annak polárosságát és reakciókészségét [1]. A gyógyszerészeti szempontból fontos lipofilitás és metabolizmus is gyakran előnyösen változnak [1]. Ezért a gyógyszerek és a mezőgazdasági vegyszerek között a fluortartalmú molekulák nagy jelentőségre tettek szert az elmúlt évtizedekben [1], ami egyre újabb fluorozó reagensek, módszerek fejlesztéséhez vezetett (fő célok: szelektivitás, kontroll, funkciós csoport tolerancia) [2,3].

Az SZTE Gyógyszerkémiai Intézetében kb. egy évtizede kiemelt kutatási téma a fluortartalmú gyűrűs kismolekulák (főleg  $\beta$ -aminosavszármazékok) szintézise [4,5]. Kutatómunkánk ehhez kívánt hozzájárulni funkcionizált gyűrűs olefinek halofluorozásával. A reakció olefinekből kapható halóniumionok feszült gyűrűjének fluoridos nyitásán alapul. Fluoridforrásként Deoxofluort alkalmaztunk, mivel e reagenst még szinte soha nem használták halofluorozásokban [6]. Megkíséreltük a termékeket a reaktívabb halogenid eliminációjával továbbalakítani. A halofluorozással rokon fluorszelenilezést is vizsgáltuk, a kapott termékek PhSe-csoportjának oxidatív eliminációját is végrehajtottuk [7].

[1] J. Han, L. Kiss, H. Mei, A. M. Remete, M. Ponikvar-Svet, D. M. Sedgwick, R. Roman, S. Fustero, H. Moriwaki, V. A. Soloshonok, *Chemical Reviews* **2021** (121) 4678-4742.

[2] T. Liang, C. N. Neumann, T. Ritter, *Angewandte Chemie International Edition* **2013** (52) 8214-8264.

[3] Szerkesztők: H. Groult, F. Leroux, A. Tressaud; *Modern Synthesis Processes and Reactivity of Fluorinated Compounds*; **2017**

[4] L. Kiss, F. Fülöp, *The Chemical Record* **2018** (18) 266-281.

[5] L. Kiss, L. Ouchakour, R. A. Ábrahám, M. Nonn, *The Chemical Record* **2020** (20) 120-141.

[6] B. Marciniak, J. Walkowiak-Kulikowska, H. Koroniak, *Journal of Fluorine Chemistry* **2017** (203) 47-61.

[7] A. M. Remete, T. T. Novák, M. Nonn, M. Haukka, F. Fülöp, L. Kiss, *Beilstein Journal of Organic Chemistry* **2020** (16) 2562-2575.

**Köszönetnyilvánítás:** Szeretném megköszönni témavezetőimnek, Prof. Dr Kiss Loránd professzor úrnak és Dr. Remete Attila Márió egyetemi adjunktusnak a munkámban és a felkészülésemben való segítségüket.

# CEMENT KIEGÉSZÍTŐANYAGOK HATÁSA A CEMENPÉP KÉMIAI ELLENÁLLÓ KÉPESSÉGÉRE

**Őze Csilla<sup>a</sup>, Kristófné Makó Éva<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup>Mérnöki Kar, Anyagmérnöki Intézeti Tanszék, Pannon Egyetem*

Napjainkban a cementtel foglalkozó kutatások egyrésze a gyártás nagy energiaigényének és környezetterhelő hatásainak mérséklésére irányul. Az egyik legnagyobb problémát a CO<sub>2</sub> kibocsátás okozza, amelynek kezelése cement kiegészítőanyagok felhasználásával kedvezően csökkenthető. Ezen anyagok továbbá csökkentik a szükséges klinker mennyiségét és kedvezően befolyásolják a cementkő tulajdonságait (pl. kémiai ellenálló képesség).

Diplomamunkámban, mechanokémiai aktiválással előállított puccolános cement kiegészítőanyagok hatását vizsgáltam a cementkő kémiai ellenálló képességére. A mechanokémiailag aktivált keverékek a részlegesen amorfizált kaolinit mellett trasszot, szilikaport vagy diatomaföldet tartalmaztak. Mivel a savas környezet legnagyobb mértékben a cement kötést károsítja, így a kísérleteimhez cementpép próbatesteket készítettem. A 28 napos szilárdulást követően a próbatesteket 1, 3 és 6 hónapos kénsavas kezelésnek vetettem alá. A savval kezelt próbatesteket optikai mikroszkóppal, energiadisziperzív röntgen analízissel (EDX), fázisösszetételét röntgendiffrakcióval (XRD), Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiával (FT-IR) és termoanalitikai (TG, DTG) módszerekkel, valamint pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) vizsgáltam.

A mechanokémiailag aktivált kiegészítőanyag kedvezően csökkenti a kénsav behatolási mélységét és a képződő korrodált réteg vastagságát. Korróziós szempontból a 25ZK\_75Si mechanokémiailag aktivált minta felhasználásával kb. 16%-al sikerült csökkentenem a kénsav behatolási mélységét a referenciához képest. Egyértelműen megállapítottam, hogy a korrodált réteg első sorban gipszből, valamint kevesebb kalcium-szilikát-hidrátból (CSH) és kalcium-aluminát-hidrátból (CAH) áll. Azt is kimutattam, hogy a kiegészítőanyaggal készült próbatestek korrodált zónájában nagyobb a CSH és CAH aránya, mint a CEM I. 42,5 N cementes referencia próbatestben.

Kulcsszavak: cement, szilikapor, kaolin, trassz, mechanokémiai aktiválás, puccolán, amorfizáció, kémiai ellenálló képesség

## **NÍVÓDÍJAS ELŐADÁSOK SZEKCIÓJA II.**



# KÉMIAI REAKCIÓ ÉS A KÖZEGMOZGÁS KÖLCSÖNHATÁSÁNAK MODELLEZÉSE SZILÁRD-FOLYADÉK RENDSZERBEN

**Papp Paszkál<sup>a</sup>, Tóth Ágota<sup>a</sup>, Horváth Dezső<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

<sup>b</sup>Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Kutatásom során az áramló közegben képződő csapadék tér- és időbeli változását tanulmányoztam. Első lépésként egy olyan modellt állítottunk fel, amelyben a reakcióban létrejövő minden egyes csapadékszemcse méretét és térbeli trajektóriáját számítani tudjuk. A modellt az OpenFOAM programcsomagba implementáltam a differenciális mérlegegyenletek megoldásához használt véges térfogatok módszerének a Lagrange-féle részecskekövetéssel történő ötvözésével. A programot két folyamat modellezésével validáltam: a vesekőképződés tanulmányozására kialakított mikrofluidikai reaktorban a kalcium-oxalát képződését [1], valamint homogén elegyből kiváló csapadékok áramlás révén történő térbeli szeparációját a kobalt(II)-réz(II)-oxalát rendszerben vizsgáltam [2].

A leülepedett kalcium-oxalát részecskék növekedése nem csak a koncentrációmezőtől, de a környezetében levő szemcsék helyzetétől is függ. Az izolált szemcsék növekedése az idővel  $t^{1/3}$  szerint skálázódik, összhangban a kísérleti tapasztalatokkal, míg nagy részecskesűrűségnél a kialakuló kompetíció miatt a növekedés gátolt. A másik rendszerben megállapítottuk, hogy a réz(II)- és kobalt(II)-oxalát részecskék térbeli szeparációjáért a réz(II)-oxalát komplexek nagyobb stabilitási állandói a felelősek, így a kobalt(II)-oxalát komplexek csak a betáplálással egyirányú gravitációs áram feletti folyadékárteregben alakulnak ki. Ennek megfelelően az áramlás messzebbre sodorja azokat, így a kobalt(II)-oxalát csapadék később és távolabb képes leülepedni, a kísérleti tapasztalatoknak megfelelően.

A kidolgozott modellel képesek vagyunk egy kémiai reakció hatására kialakuló heterogén rendszer szimulációjára úgy, hogy figyelembe vesszük a folyadékáramlás és a képződő részecskék közötti kölcsönhatást is.

[1] K. Rakotozandriny, S. Bourg, P. Papp, Á. Tóth, D. Horváth, I. T. Lucas, F. Babonneau, C. Bonhomme, A. Abou-Hassan, *Crystal Growth & Design*, **2020** (20) 7683-7693.

[2] E. Tóth-Szeles, B. Bohner, Á. Tóth, D. Horváth, *Crystal Growth & Design*, **2017** (17) 5000-5005.

## KALCIUM(II) – ALGINÁT AEROGÉL HIDRATÁCIÓS MECHANIZMUSA

**Papp Vanda<sup>a</sup>, Kéri Mónika<sup>a</sup>, Kalmár József<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032. Debrecen, Egyetem tér 1.*

<sup>b</sup>*Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032. Debrecen, Egyetem tér 1.*

A Ca(II)- alginát aerogél, mint poliszacharid alapú aerogél, a hagyományos aerogélek kedvező tulajdonságain túl biokompatibilis, biodegradábilis, és figyelemreméltóan jó mechanikai tulajdonságokkal rendelkezik. Szerkezetének akár kisfokú megváltozása jelentősen befolyásolja az aerogél makroszkopikus tulajdonságait. Az egyik legszignifikánsabb hatást kiváltó folyamat a hidratáció, melyet akár a levegő nedvességtartalma mellett is érzékelhetünk. Munkám során egy Ca(II) - alginát alapú aerogél hidratációját és az általa kiváltott szerkezeti változásokat vizsgáltam, speciális NMR technikák alkalmazásával. A hidratációs mechanizmus átfogó leírásához, több hazai és nemzetközi partner együttműködésével számos módszert alkalmaztunk. [1]

Az aerogél eredeti pórusszerkezetét folyékony közegben (ciklohexán) NMR krioporozimetriás méréssel karakterizáltuk, és a korábbi N<sub>2</sub> gázporozimetriás és kisszögű neutronszerzéses eredményekkel összhangban megállapítottuk, hogy a mezopórusos mintában ~25 nm sugarú pórusok találhatóak. Különböző víztartalmú minták esetén relaxometriás mérésekkel sikeresen meghatároztuk a rendszerben jelenlévő víz doméneket és arányukat, melyek mozgékonyaságáról a diffúziometriás mérések adtak információt. [1] Megállapítottuk, hogy hidratáció hatására a pórusszerkezet radikális változáson megy keresztül, ~ 0,7 g/g víztartalomnál a pórusos rendszer megszűnik és egy hidrogélszerű mátrix alakul ki. Munkám során homogén és inhomogén mágneses térben is vizsgáltam a rendszer hidratációja során fellépő dinamikus folyamatokat. Az inhomogén térben, egyszerű szekvenciák alkalmazásával történő vizsgálatok jó egyezést adtak a bonyolultabb, nagyterű diffúziós mérések eredményeivel. [1] Összefoglalva, több egymást kiegészítő módszer alkalmazásával sokoldalúan feltérképeztük egy hidrofil nanostrukturális anyag szerkezetét, valamint száraz és nedves közegű viselkedését, mellyel hozzájárulhatunk az ipari igényeket célzó felhasználásához.

[1] A. Forgács et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2021** 13 (2), 2997–3010.

**A projekt a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatásával (OTKA FK\_124571) valósult meg.**

## LIPOPEPTIDEK VIZSGÁLATA CE-MS MÓDSZERREL VÍZMENTES KÖZEGBEN

**Patyi Gábor<sup>a,b</sup>, Fenyvesiné Páger Csilla<sup>a</sup>, Sándor Viktor<sup>a</sup>, Kiss Ibolya Ilona<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Bioanalitikai Intézet, Általános Orvostudományi Kar, Pécsi Tudományegyetem, 7624 Pécs, Szigeti út 12.

<sup>b</sup>Kémiai Intézet, Természettudományi Kar, Pécsi Tudományegyetem, 7624 Pécs, Ifjúság útja 6.

A bakteriális eredetű lipopeptidek az ún. biokontroll ágens hatással rendelkező vegyületek egy családját képezik, s napjaink növény-, állat- és humán egészségügyi alkalmazásainak egyre nagyobb tekintéllyel rendelkező szereplői [1].

Munkánkban tervezéses módszerfejlesztéssel (a témában elsőként) vízmentes kapilláris elektroforézissel (NACE) vizsgáltunk néhány ciklikus lipopeptid családot. A módszerfejlesztést követően a sikeresen elválasztott komponensek szerkezeti vizsgálatát is elvégeztük tandem tömegspektrometria alkalmazásával.

A kemometria módszertanának alkalmazásával végeztük a módszerfejlesztést, ugyanis a vízmentes közegben végrehajtott elektroforézis gyakorlatáról kevés a tapasztalat. Ezt sikeresen hidaltuk át kísérlettervezéses módszerekkel, így az optimális mérési körülmények meghatározása számításon és statisztikai alapokon kevés kísérlet végrehajtásával is gyors és célravezető volt.

A kidolgozott módszer mérési körülményei között a fengicinek pozitív, a szurfaktinok pedig negatív töltéssel rendelkeztek. E két ciklikus lipopeptid család egymástól sikeresen volt elválasztható, csakúgy mint az egyes izomer- és homológ vegyületeik is. Ez utóbbi megállapítást tandem MS módszerrel igazoltuk korábban leírt és azonosított lipopeptidek szakirodalomban publikált példái alapján [2,3], mely során egy eddig ismeretlen, C<sub>20</sub>-as zsírsavláncot tartalmazó fengicinvegyületet is sikerült elkülönítenünk.

[1] K. R. Meena, S. S. Kanwar; *BioMed Research International*, **2015** (5) 1-9.

[2] Y. Ma, Q. Kong, C. Qin, Y. Chen, Y. Chen, R. Lv, G. Zhou; *AMB Express*, **2016** (6) 79.

[3] X. Y. Li, Z. C. Mao, Y. H. Wang, Y. X. Wu, Y. Q. He, C. L. Long; *Journal of Molecular Microbiology and Biotechnology*, **2012** (22) 83-93.

**Elsősorban témavezetőimnek köszönöm az iránymutatást, az időt és türelmet, hogy ez a munka érdemben elkészülhessen. Köszönettel tartozunk a Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem Csíkszeredai Kar munkatársainak, hogy rendelkezésünkre bocsátották az előkészített lipopeptid mintákat.**

# POLIURETÁN HABKÉPZŐDÉS VIRTUÁLIS ÉS IPARI OPTIMALIZÁCIÓJA

**Pecsmány Dániel<sup>a,b</sup>, Viskolcz Béla<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>*Korszerű Anyagok és Intelligens Technológiák Felsőoktatási és Ipari Együtműködési Központ, Miskolci Egyetem, H-3515 Miskolc-Egyetemváros.*

<sup>b</sup>*Kémiai Intézet, Műszaki Anyagtudományi Kar, Miskolci Egyetem, H-3515 Miskolc-Egyetemváros*

A gyártási optimalizációs műveletekben különböző szimulációs programok alkalmazása nem csak az optimalizációs időt csökkenti, hanem lehetőséget nyújt a fizikai, illetve kémiai folyamatok ismeretében gyártáskiesés nélküli fejlesztési műveletek elvégzésére is.

Kutatómunkám során egy automatizált lágyhab gyártócella részegységének optimalizációját végeztem el, melynek során az FSB (Front Seat Back – első ülés háttámla) forma töltési tulajdonságainak javítása és reprodukálható gyártási program elkészítése volt a cél. A kutatás részét képezte egy szimulációs környezet kialakítása (ABB RobotStudio 2019), amely a valóságban alkalmazott gyártócella méretpontos modellezését jelentette. Ebben a szimulációs környezetben költséghatékonyan lehetett megtervezni a cellában található robot injektálási útvonalait [1]. A tervezett útvonalakat a valós cellában implementáltam, majd ezt követően a virtuális modell validálására került sor. Az alap habrendszer laboratóriumi paramétereinek meghatározását követően egy egyszerű geometriával rendelkező formával próbagyártásokat végeztem az optimális gyártási paraméterek megállapítása céljából [2]. Az FSB forma optimalizációja során az anyagszerkezeti hibák kiküszöbölése érdekében módosítottam az alapreceptúrát, amellyel a poliuretán rendszer start-ideje is megnőtt az elvártaknak megfelelően (25 s).

A modifikált habrendszerrel történő gyártás eredményeként egy tökéletes töltési minőséggel rendelkező, anyagszerkezeti hibáktól mentes formahab termék készült el, amelynek mechanikai tulajdonságait összehasonlítottam az eredeti rendszer tulajdonságaival szabványos vizsgálatok során.

[1] P. Abreu, M. R. Barbosa, A. M. Lopes; Virtual experiment for teaching robot programming, **2014**, 395–396.

[2] F. Farkas: Poliuretánok; Lágy poliuretánhab féleségek, **2004**, 242-310.

**Köszönet a Miskolci Egyetemen megvalósított GINOP-2.3.4-15-2016-00004 „Korszerű anyagok és intelligens technológiák FIEK létrehozása a Miskolci Egyetemen” projektnek, amely az Európai Unió, valamint a Magyar Állam támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.**

# KAPILLÁRIS ELEKTROFORÉZISSEL KAPCSOLT TÖMEGSPEKTROMETRIÁS MÓDSZER KIDOLGOZÁSA ARTEMIZININ MEGHATÁROZÁSÁRA

**Pesti Anna<sup>a</sup>, Nagy Cynthia<sup>a</sup>, Gáspár Attila<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.*

A kutatómunkám során egy hatékony MEKC-MS (micelláris elektrokinetikus kromatográfiás-tömegspektrometriás) módszert dolgoztam ki az artemizinin meghatározására. Az artemizinin az *Artemisia annua* - magyar nevén egynyári üröm - egyik fontos hatóanyaga, amelyet a növény leveléből nyernek ki általában etanolos extrakcióval. Az artemizint világszerte használják a malária kezelésére, illetve rákkezelések kiegészítő terápiájaként. Emellett manapság is kutatások folynak a különböző vírusos betegségek elleni alkalmazhatóságával kapcsolatban [1]. Az artemizinin nem tartalmaz sem kromofor, sem fluoreszcens csoportot, bár a vegyület szerkezeti képletében látható egy endoperoxid csoport, amelynek köszönhetően az artemizinin rendelkezik kismértékű UV- aktivitással, de ez még nem biztosít érzékeny detektálást. Az előbb említett okok miatt az artemizinin detektálása UV-VIS vagy fluoreszcens technikával nem megfelelő, azonban a tömegspektrometriás meghatározás megoldást nyújthat a problémára [2]. A kutatómunkám során elsőként optimált MS-módszerekkel végeztem a méréseimet, amely során megállapítottam, hogy az artemizinin pozitív ion módban detektálható, ennek megfelelően a későbbiekben egy CZE-MS (kapilláris zónaelektroforézis - tömegspektrometriás) módszer dolgoztam ki pozitív ionmód alkalmazása mellett. Az artemizinin oldatban nem ionizálható, ezért CZE-MS méréseknél más töltésnélküli komponensekkel együtt, egy csúcsként jelent meg az elektroferogramon. A töltésnélküli komponensek elválasztására a micelláris elektrokinetikus kromatográfiás (MEKC) technika nyújt megoldást. Ennek megfelelően a kísérleteimet egy MEKC-MS módszer optimalizálásával folytattam, amely során a különböző artemizinin diasztereomerek detektálása mellett más, szerves komponensek azonosítása is lehetővé vált a reálminták elemzése során, mint az aszkaridol vagy a kaszticin. Az artemizinin minőségi meghatározása mellett a mennyiségi meghatározásához szükséges méréseket is elvégeztem. A hatpontos kalibráló egyenes jó linearitást mutatott ( $R^2=0,9984$ ) 0,6-60  $\mu\text{g/ml}$  koncentrációtartományban. Eredményeim legfőbb tanulsága, hogy a CE-MS módszer nemcsak ionos komponensek, de akár töltésnélküli vegyületek elválasztására is alkalmas lehet, ha megfelelően illékony micellaképzőt használunk a háttérelktrolitban.

[1.] Su Xin-Zhuan, Miller Luis H.,: Science China- Life Sciences, 58 (11) (2015), 1175-1179.

[2.] Chen, H.L., et al., (2002) Electrophoresis, 23(17) 2865-2871.

**Köszönöm témavezetőmnek, Dr. Gáspár Attilának, valamint Nagy Cynthiaának és Dr. Andrási Melindának a diplomamunkám készítése során nyújtott segítségét. Emellett köszönöm Prof. Vasas Gábornak, hogy biztosította a méréseimhez szükséges mintákat.**

# NEM-HEM-VASTARTALMÚ MODELLEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS GYAKORLATI ALKALMAZÁSAI

**Török Patrik<sup>a</sup>, Kaizer József<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, Bioszerves és Biokoordinációs Kémia Kutatócsoport. 8200 Veszprém Wartha Vince u. 1.*

Az aldehid deformiláz oxigenáz (ADO) egy nem-hem vastartalmú enzim, amelynek a hosszú szénláncú aldehidek alkánokká történő átalakításának utolsó lépésében van fontos szerepe. Az enzim dioxigén aktiválás révén alakítja ki a reaktív formáját.

Munkám során ezt az intermediert próbáltam meg modellezni különböző szerkezetű kétmagvú peroxo-Fe(III) komplexek *in situ* kialakításával. Ehhez egymagvú Fe(II) prekursor komplexeket és H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-ot alkalmaztam. A kapott részecskét különböző aldehidekkel (pl. fenil-acetaldehid, ciklohexán-karboxaldehid) történő deformilezési reakciókban vizsgáltam. Kísérleteim során részletes reakciókinetikai mérések (UV-Vis spektroszkópia) segítségével igazolni tudtam a kétmagvú peroxo-Fe(III) részecske szerepét a folyamatban. Így közelebb kerültünk az oxidoreduktáz enzimek működésének megértéséhez, amellyel új hatékony katalizátorok szintézisére nyílnak lehetőségekünk.

# **ANALITIKAI KÉMIA SZEKCIÓ**

# AZ EXTRACELLULÁRIS VEZIKULÁK FEHÉRJE ÉS LIPID MENNYISÉGÉNEK JELÖLÉSMENTES MEGHATÁROZÁSA INFRAVÖRÖS SPEKTROSKÓPIÁVAL

**Bebesi T.<sup>a</sup>, Szentirmai V.<sup>a</sup>, Kitka D.<sup>a</sup>, Szikszai B.<sup>a</sup>, Rácz A.<sup>a</sup>, Bóta A.<sup>a</sup>, Wacha A.<sup>a</sup>, Varga Z.<sup>a</sup>,  
Mihály J.<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup>Biológiai Nanokémiai Kutatócsoport, Anyag- és Környeztkémiai Intézet, Természettudományi  
Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.*

A sejtek által spontán kibocsátott extracelluláris vezikulák (EV-k) fontos szerepet töltenek be a sejtek közti kommunikációban. Speciális összetételüknek és méretüknek (lipid kettősréteggel határolt, általában 200 nm alatti nanorendszerek, amelyek fehérjéket és RNS-t is tartalmaznak) köszönhetően a jellemzésükre alkalmazható módszerek még fejlesztés alatt állnak. Infravörös (IR) spektroszkópiai módszert az utóbbi pár évben alkalmazzák EV-k jellemzésére, de a módszer által nyújtott lehetőségek még nincsenek teljes mértékben kiaknázva. Mivel az IR spektroszkópia egyidejűleg információt nyújt a fehérjékről, lipidekről és / vagy más EV komponensekről, egyetlen kvantifikációs protokoll mind a fehérjékhez, mind a lipidekhez (foszfolipid) elegendő lehetne.

Az eritrocita koncentrátumokban ex vivo képződött nagyméretű EV-eket (mikrovezikulák) IR spektroszkópiával vizsgáltuk. Az amid I sáv integrált területe bebizonyosodott, hogy arányos az EV-minták fehérjemennyiségével (legfeljebb 1 mg / ml), függetlenül annak másodlagos szerkezetétől. Marha-szérum albumin (BSA) kalibráción alapuló eredményeket a nyers spektrumok többváltozós adatelemzése (legkisebb négyzetek regressziója) is alátámasztotta.

Az EV-k elengedhetetlen molekuláris komponensei a lipidek, de pillanatnyilag számszerűsítésükről csak korlátozott ismeretek állnak rendelkezésre. Arra törekszünk, hogy kidolgozzunk egy megfelelő lipid kalibrációt marha-szérum albumin és szintetikus lipidekből készített referencia vezikulákkal, és ezáltal az IR spektroszkópia lehetőségeit kibővítsük.

**A kutatás az NKFIH K 131594 és K 131657 OTKA pályázatok támogatásával készült.**



# VATTA-HILIC ÉS GRAFIT ALAPÚ SZILÁRD FÁZISÚ EXTRAKCIÓS MINTAELŐKÉSZÍTÉSI MÓDSZEREK GLÜKÓZAMINOGLIKÁNOK TISZTÍTÁSÁRA

**Fügedi Kata Dorina<sup>a,b</sup>, Tóth Gábor<sup>a,b</sup>, Drahos László<sup>a</sup>, Turiák Lilla<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *ELKH TTK MS Proteomika Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar tudósok krt.2.*

<sup>b</sup> *BME VBK Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest, Szt.Gellért tér 4.*

A glükózaminoglikánok (GAG-ok) olyan heterogén méreteloszlású és polaritású poliszacharid makromolekulák, melyek építőegységei diszacharid cukrok. Az eltérő polaritást a cukorlánc mentén különböző pozícióban elhelyezkedő szulfátcsoportok okozzák. A GAG-ok képviselői közül a legnagyobb változatosságot a heparán-szulfátok (HS) mutatják, mely csoportnál az ismétlődő diszacharid egységek akár három szulfát csoportot is hordozhatnak. Intakt vizsgálatuk jelentős heterogenitásuk miatt kihívásokkal teli feladat, ezért műszeres analízisük előtt enzimatikus vagy kémiai emésztéssel diszacharid egységekre bontják azokat. Az emésztési lépést követően azonban szükséges a minták szennyezőktől való megtisztítása, ami a polaritásbeli változatosság miatt igencsak nehézkes feladat.

Vizsgálataink során célul tűztük ki egy olyan szilárd fázisú extrakciós (SPE) módszer fejlesztését, mely alkalmas lehet kis mennyiségű biológiai mintákból kinyert HS diszacharid keverék tisztítására. Ezt GAG-ok esetén korábban még nem alkalmazott saját töltésű, HILIC-típusú vatta töltetű SPE-vel valósítottuk meg. Emellett munkánk során összehasonlítottunk három eltérő technológiájú, kereskedelmi forgalomból is beszerezhető grafit töltetű SPE rendszert, az ajánlott protokollokat kombinálva, majd kiválasztottuk a legjobbnak bizonyuló módszert.

Megállapítottuk, hogy az általunk fejlesztett vatta-HILIC módszer és az irodalomban is elterjedt grafit alapú módszerek eltérő szelektivitással bírnak, így a két módszer kombinációja mellett döntöttünk. Az általunk fejlesztett kombinált módszerben a vatta-HILIC tisztítás átfolyó frakcióját egy grafitos tisztításnak vetjük alá, majd a két elúciós frakciót kombinálva közel 100%-os visszanyerés érhető el minden egyes HS diszacharidra.

**Köszönetnyilvánítás: A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj és a NKFIH OTKA PD 121187 és OTKA FK 131603 pályázatok támogatásával készült.**

## A BIOEKVIVALENCIA ELŐREJELZÉSÉRE ALKALMAS MÓDSZEREK ÖSSZEVETÉSE ARIPIPRAZOL TARTALMÚ KÉSZÍTMÉNYEK ESETÉBEN

**Kádár Szabina<sup>a</sup>, Kennedy Andrew<sup>b</sup>, Lee Samuel<sup>b</sup>, Ruiz Rebeca<sup>b</sup>, Farkas Attila<sup>a</sup>,  
Nagy Zsombor Kristóf<sup>a</sup>, Borbás Enikő<sup>a</sup>, Sinkó Bálint<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest  
Műegyetem rakpart 3.

<sup>b</sup>Pion Inc., 10 Cook Street, Billerica, MA 01821, USA

A gyógyszeriparban hagyományos kioldódási vizsgálatokat alkalmaznak a gyógyszerkészítmények gyártási folyamat minőség-ellenőrzésének elvégzésére, valamint a különféle gyógyszerkészítmények bioekvivalenciájának összehasonlítására a fejlesztési folyamatuk során. Noha ezen mérések alkalmasak minőség-ellenőrzési célokra, hiszen lehetővé teszik a végső adagolási formák elemzésének egyszerű, reprodukálható és költséghatékony módját, viszont a várható biohasznosulás előrejelzésére nem minden esetben alkalmasak, hiszen gyakran nem mutatnak megfelelő *in vivo* korrelációt, mivel a kioldódást segítő adalékok: ciklodextrinek, polimerek és felületaktív anyagok negatív és pozitív irányba egyaránt képesek befolyásolni a biológiai membránokon keresztül történő transzport folyamatokat.

Mivel a gyógyszerfejlesztés területén többféle módszer használatos a biohasznosulás előrejelzésére, így vizsgálataink tárgyát képezte, hogy előrejelzési potenciáljukat tekintve összehasonlítsuk a kis és nagy térfogatú fluxus vizsgálatokat a kétfázisú kioldódással végzett mérési eredményekkel 5 aripiprazol tartalmú forgalomba hozott generikus készítményeinek bioekvivalenciájára vonatkozóan. Végül a fluxus és kétfázisú kioldódás vizsgálatok során kapott eredményeket összevetettük az *in vivo* humán adatokkal.

A mérési eredmények egyértelműen rámutattak arra, hogy a kis és nagy térfogatú fluxus vizsgálatok megfelelő bioekvivalencia előrejelzést nyújtanak. A kétfázisú kioldódás vizsgálat a teljes adagolási forma vizsgálatokor nem bizonyult alkalmas módszernek a bioekvivalencia előrejelzésére, viszont a továbbiakban a csökkentett dózis alkalmazása jelentősen javította az előrejelzést és így kapott mérési eredmények jó egyezést mutattak az *in vivo* adatokkal.

Összességében elmondható, hogy mindhárom módszer alkalmasnak bizonyult a készítmények összehasonlítására, bár a nagy térfogatú fluxus vizsgálati módszer volt az egyetlen, amely képes volt a végső adagolási forma vizsgálatára, és megfelelő előrejelzést nyújtott a készítmények rangsorolására.

# MELOXICAM SZEMCSEMÉRETÉNEK VIZSGÁLATA TABLETTÁKBAN GÉPI LÁTÁSI RENDSZERREL

**Mészáros Lilla Alexandra<sup>a</sup>, Farkas Attila<sup>a</sup>, Nagy Zsombor Kristóf<sup>a</sup>**

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

A gyógyszeriparban a figyelem középpontjában álló folyamatos gyártási rendszerek és a feltörekvő technológiák a modernizáció és az innováció fő képviselői. Ezen új irányvonalakat a gyógyszerhatóságok is támogatják. Az általuk publikált ajánlások és keretrendszerek lehetővé teszik a gyártási folyamat nyomon követését, adatok gyűjtését, a folyamatok megértését és szabályozását. Gyógyszeripari alkalmazás szempontjából a gépi látásban rejlő potenciál még nem került kiaknázásra, azonban várhatóan forradalmian új megoldásokat biztosíthat a folyamatos technológiákkal megvalósított gyártás, a folyamat közbeni analitikai vizsgálatok és a végső termék tesztelése során. A gépi látás folyamatfelügyelő-, és analizáló rendszerbe való integrálása lehetőséget biztosíthat a termékbe tervezett minőség (QbD) és a valós idejű felszabadítás (RTRT) megvalósítására.

A tabletták előállításának lépései befolyásolhatják a hatóanyag szemcseméretét, ami hatással lehet a végső termék hatékonyságára. A QbD megközelítés szempontjából ez a paraméter kritikus minőségi jellemzőnek tekinthető, azonban intakt tabletták esetében történő vizsgálatának körében jelenleg is csak néhány publikáció áll rendelkezésre. A terület relevanciáját tekintve az előadásom során egy általam fejlesztett gépi látást alkalmazó rendszer kerül bemutatásra, melynek célja bevonat nélküli, meloxicam tartalmú tabletták esetében a hatóanyag szemcseméret-eloszlásának becslése, valamint hatóanyag szemcsemérete szerinti osztályozása. A tablettákról UV és VIS megvilágítással képeket készítettem. A megfelelő képfeldolgozó algoritmusok fejlesztését követően az osztályozási feladatot mintázatfelismerő neurális hálók felhasználásával hajtottam végre. A hatóanyag szemcseméret-eloszlásának becslésére terület ekvivalens átmérők meghatározásán alapuló algoritmusokat készítettem.

A neurális hálók esetében a kereszt-entrópia értékek, valamint a mért és a prediktált szemcseméret-eloszlások statisztikai összehasonlítása alapján az általam fejlesztett rendszer sikeresen alkalmazható meloxicam tartalmú tabletták esetében a hatóanyag szemcseméret-eloszlásának meghatározására, valamint tabletták esetében a hatóanyag szemcsemérete szerinti osztályozására.

# AZ ANTIMIKROBIÁLIS ANION ALAPÚ IONOS FOLYADÉKOK SZINTÉZISE ÉS HIDRATÁCIÓS TULAJDONSÁGAI

**Nikolett Cakó Bagány<sup>a</sup>, Milan Vraneš<sup>a</sup>, Jovana Panić<sup>a</sup>, Snežana Papović<sup>a</sup>,  
Teona Teodora Borović<sup>a</sup>, Slobodan Gadžurić<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Újvidéki Egyetem, Természettudományi-matematikai Kar, Trg Dositeja Obradovića 3., Újvidék, Szerbia

Az elmúlt két évben a pandémia rámutatott arra, hogy hiányosak a fertőtlenítési módszereink és a legtöbbször erre a célra használt anyagoknak, mint az etanol és a nátrium-hipoklorit számtalan hátránya van. Az etanol könnyen párologó már szobahőmérsékleten is, ezért a védelem a kórokozókkal szemben csak nagyon rövid ideig tart, míg a nátrium-hipoklorit az UV sugárzás hatására lebomlik és ez a folyamat még káros is lehet az egészségünkre. Ezek miatt nélkülözhetetlen az olyan anyagok előállítása, amik kiküszöbölhetik ezeket a hiányosságokat, vagyis amiknek antimikrobiális hatásuk van, de emellett stabilak és biztonságos a használatuk is. Ezekre a problémákra megoldást jelenthetnek az ionos folyadékok (ILs), amik olyan szerves sók, melyeknek az olvadáspontja 100 °C alatt van, a többségük pedig folyékony már szobahőmérsékleten is. Emellett számos előnyös tulajdonsággal rendelkeznek, amik közül az egyik legjelentősebb, hogy a tulajdonságaik alakíthatóak, mégpedig a megfelelő kation és anion kombinálásával [1].

Mindezek miatt, a kutatómunka elsődleges célja az ionos folyadékok, az 1-butil-3-metil-imidazólium-benzoát [BMIM][Ben] és az 1-butil-3-metil-imidazólium-mandelát [BMIM][Man] szintézise volt. Az előállítás során használt benzoésav bizonyítottan antimikrobiális hatású [2]. A mandulasav szintén rendelkezik bakteriosztatikus hatással [3], míg az 1-butil-3-metil-imidazólium-klorid kitűnő fizikai-kémiai tulajdonságai az aromás gyűrűnek köszönhetőek. A szintézis sikeressége NMR spektroszkópia segítségével lett alátámasztva, majd a vizes oldatok sűrűségének mérésével, a hidratációs tulajdonságok lettek vizsgálva, amik alapján látható, hogyan hat a víz szerkezetére a vizsgált ionos folyadékok jelenléte. A mérések eredményei alapján látható, hogy mindkét ionos folyadék esetében *structure making* tulajdonságokról beszélhetünk, amit a *Hepler* koefficiens mellett a látszólagos moláris térfogatra kapott eredmények is alátámasztanak. Ezeknek a tulajdonságoknak a meghatározása pedig azért nagyon fontos, mert ezek alapján sokat kikövetkeztethetünk abból, hogy milyen hatással lehet az ionos folyadék a mikroorganizmusokra.

[1] K. R. Seddon; *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, **1997** (68) 351–356.

[2] A. Del Olmo, J. Calzada, M. Nunez; *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, **2017** (57) 3084-3103.

[3] R. Choińska, K. Dąbrowska, R. Świsłocka, W. Lewandowski, A. H. Świergiel; *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, **2021** (21) 2556-2562.

# KARVEDILOL-CIKLODEXTRIN KOMPLEX KIOLDÓDÁS-FELSZÍVÓDÁS VIZSGÁLATA

**Tózsér Petra<sup>a</sup>, Gyáfrás Lilla Vivien<sup>a</sup>, Jaksáné Borbás Enikő<sup>a</sup>, Sinkó Bálint<sup>b</sup>,  
Nagy Zsombor Kristóf<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest,  
Műegyetem rakpart 3.*

<sup>b</sup> *Pion Inc., Billerica MA, USA*

Az originális fejlesztésben lévő gyógyszerjelölt molekulák több, mint 70%-a rossz vízoldhatóságú és jó permeabilitású, ezért a gyógyszer-technológia kiemelkedően fontos kihívásai közé tartozik, ezen BCS II csoportba tartozó hatóanyagok kioldódásának javítása és ezen keresztül a biohasznosulásuk növelése. A kioldódást segítő formulációs segédanyagok negatív és pozitív irányba egyaránt képesek befolyásolni a biológiai membránokon keresztül történő transzport folyamatokat. Ezért a hagyományos kioldódás méréseken túlmutató eredményeket érhetünk el a kioldódás és felszívódás szimultán vizsgálatára alkalmas  $\mu$ FLUX készülék segítségével.

A kioldódás-felszívódás vizsgálatok elvégzéséhez a rossz vízoldhatóságú, bázikus karakterű karvedilolt választottuk modell hatóanyagként. A választott hatóanyag polimorf módosulatainak a termodinamikai és kinetikai oldhatóságának meghatározását is célul tűztük ki, ezáltal méréseink során figyelembe véve az oldhatóság és a permeabilitás közötti kölcsönhatásokat. Az oldhatóság vizsgálatokat a szabad hatóanyag és a formulációs segédanyagként alkalmazott hidroxipropil-béta-ciklodextrin (HP- $\beta$ -CD) jelenlétében is elvégeztük.

A HP- $\beta$ -CD szolubilizáló képességének jobb megértése céljából vizsgáltuk a HP- $\beta$ -CD komplexképzését a hatóanyaggal. A felvett fázis-oldhatóság diagramok alapján azt találtuk, hogy a vizsgált koncentráció tartományon a HP- $\beta$ -CD 1:1 arányú komplexet képez a karvedilollal. Meghatároztuk a komplex egyensúlyi állandóját a szilárd karvedilol felesleg mellett, valamint a hatóanyag metanolos oldatának adagolása esetén is.

**A kutatásban nyújtott támogatást köszönjük a Semmelweis Egyetem Gyógyszerészi Kémia Intézetének.**

# NMR DINAMIKAI JELENSÉGEK IONOS TENZIDEK VIZES OLDATÁBAN

Nyul Dávid<sup>a</sup>, Bányai István<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Az NMR, mint szerkezetvizsgáló és összetétel meghatározó módszer széles körben használatos. Kevesebb említés történik arról, hogy viszonylag hosszú relaxációs idők miatt molekuláris mozgások megfigyelésére alkalmas. [1] Az NMR relaxációs módszerek értékes adatokkal szolgáltattak a molekulák rotációs mozgásáról és a kémiai egyensúlyok dinamikájáról. [2] A gradiens impulzusok kiadására alkalmas mérőfejek piaci megjelenésével a molekulák és részecskék transzlációs diffúziója is könnyen tanulmányozhatóvá vált. [3] Ez a módszer nagy lendületet adott az NMR alkalmazásának mind a diszperziós mind liofil kolloidok területén.

Munkánk során nátrium-decil-szulfát tenzid nehézvízes oldataiban végeztünk <sup>1</sup>H és <sup>23</sup>Na NMR kísérleteket, és ebben a viszonylag egyszerű és jól ismert rendszerben számos érdekes jelenségre bukkantunk. <sup>1</sup>H NMR diffúziometriával, a koncentrációt, a hőmérsékletet és az NMR paramétereket változtatva a cmc-t és a micella diffúzió együtthatóját határoztuk meg. <sup>23</sup>Na NMR diffúziometria az ellenion szerepéről adott információt.[4] A legérdekesebb megfigyelésünk az volt, hogy a tenzidek (monomer és micelláris formájuk) átlagos látszólagos diffúzió együtthatója nő a diffúzió idő növekedésével. Eddig ilyen kísérleti eredményt nem találtunk az irodalomban. A jelenséget kísérletileg részletesen megvizsgáltuk, majd modellszámításokkal arra jutottunk, hogy a jelenség legvalószínűbb magyarázata egy csere folyamat az oldatban levő és a micellában található tenzid között. [5]

[1] J. K. M. Sanders *Modern NMR Spectroscopy: A Guide for Chemist*, (2nd ed.) **1993**, Oxford University Press, New York

[2] I. Bányai *New Journal of Chemistry*, **2018** (42) 7569-7581

[3] C. S. Johnson *Progress in NMR spectroscopy*, **1999** (34) 203-256

[4] O. Söderman, P. Stilbs *Progress in NMR spectroscopy*, **1994** (26) 445-482

[5] C.S. Johnson *Journal of Magnetic Resonance*, **1992** (102) 214-218

# **SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ I.**

## ELJÁRÁS HANTZSCH ÉSZTER SZÁRMAZÉKOK ELŐÁLLÍTÁSÁRA

**Demeter Adrienn Katalin<sup>a</sup>, Bogdán Dóra<sup>b</sup>, Barcza Tibor<sup>b</sup>, Herke Klára<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Semmelweis Egyetem, Budapest, Üllői út 26, 1085*

<sup>b</sup> *Semmelweis Egyetem, Szerves Vegytani Intézet, Budapest, Hőgyes Endre u. 7.*

Az 1,4-dihidropiridin (DHP) származékok, más néven Hantzsch észterek, enyhe redukálószer, gyenge hidrid forrásként is alkalmazhatók. Először 1882-ban szintetizált ilyen vegyületeket Arthur Hantzsch, ún. hagyományos módszerrel. Miután 1975-ben bevezették őket klinikai használatba, a DHP származékok kardiovaszkuláris hatásukról ismeretesek, főleg, mint kalcium csatorna-blokkolók.

Fő célunk az volt, hogy H. Singh és K. Singh [1] módszerét tovább fejlesszük. A munka első szakaszában két áramlásos kémiai módszert használtunk, majd a második szakaszban az egyiket további származékokra kiterjesszük. Az előállítási módszer általánosságban: (3Z)-4-aminopent-3-én-2-on (enaminokarbonil) származékokat reagáltattunk 3-metil-1,3-oxazolidinnel, jégecetes katalízis mellett, acetonitrilben oldva. Párhuzamosan vizsgáltuk a keletkezett DHP származékok előállíthatóságát a hagyományos és a mi módszerünkkel. A hagyományos reakciók kivitelezésére egy-üst módszert használtunk.

A munka során először a kiindulási enaminokarbonil származékok előállítását kellett elvégezni és optimalizálni. Gondot jelentett, hogy az irodalomban leírt reakciókban általában ammónium-acetátot használtak, azonban egyes így előállított vegyületeknél a nem megfelelő konverzió (90% alatti) elválasztási és tisztítási problémát jelentett. Ezért volt szükséges a továbbfejlesztés, amit ammónia alkoholos oldatával sikerült elérni, így a két módszert kombinálva sikerült az összes tervezett enaminokarbonilt szintetizálni. Ezután a második szakaszban, az így kapott kiindulási anyagokkal elvégezve az előirányozott reakciókat az új előállítási módszer alapján, elő tudtunk állítani öt származékot a hagyományos eljárással és a mi új módszerünkkel is, melyeknek az irodalomban ismeretes már az előállítása, de nem a mi módszerünkkel. Ezekon kívül egy teljesen ismeretlen molekulát is elő tudtunk állítani a Hantzsch szintézissel.

Az általunk használt eljárással további vegyületeket állítottunk elő. Azokban az esetekben, ahol a hagyományos eljárás kevésbé alkalmas oldhatósági nehézségek miatt, a szintézis áramlásos kémiai módszerekkel megvalósítható megfelelő optimalizálás után.

[1] Singh, H. and K. Singh, *Tetrahedron*, **1989**. 45(12), 3967-3974.

**Köszönetünket nyilvánítjuk Gáti Tamásnak a NMR mérésekért.**



# 1,4-SZUBSZTITUÁLT HANTZSCH-ÉSZTER (1,4-DIHDROPIRIDIN) SZÁRMAZÉKOK OXIDÁCIÓJA KÜLÖNBÖZŐ OXIDÁLÓSZEREKKEL

**Bancsó Bettina<sup>a</sup>, Bogdán Dóra<sup>b</sup>, Barcza Tibor<sup>b</sup>, Herke Klára<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Semmelweis Egyetem Gyógyszerésztudományi Kar,*

<sup>b</sup>*Szerves Vegytani Intézet, 1092 Bp. Högyes Endre u. 7.*

Farmakológiai szempontból a Hantzsch-észter származékok, azaz az 1,4-dihidropiridin (DHP) típusú kalcium-csatorna blokkolók fontos szerepet játszanak a szív- és érrendszeri betegségek kezelésében. Ezek a vegyületek legtöbb esetben a májban elsődleges oxidatív metabolizmuson mennek át, miközben redoxi tulajdonságaiknak köszönhetően a megfelelő piridin származékokká alakulnak. Az oxidatív stressz (OS) ellen már vizsgálták őket, mivel a DHP – mint potenciális antioxidáns specifikus szerkezeti elem – bioprotektív tulajdonságokkal bír.

A Hantzsch észterek oxidációs folyamatát bemutató modellreakciót alapul véve célul tűztük ki, hogy megfelelő módszert találjunk az általunk kiválasztott anyagok eredményes oxidálására. Első körben N-en szubsztituált DHP-k oxidálására tettünk kísérletet különböző oxidálószeres savas kombinációját felhasználva; majd áttértünk a N-en nem szubsztituált származékok vizsgálatára is.

Eddigi munkánk eredményeként sikerült alkalmas oxidálószeret találnunk a vizsgált Hantzsch-észter származékok oxidálására, amelyek segítségével előállítottuk a megfelelő piridin és piridinium sókat. E célból végül cérium-ammónium-nitrátot (CAN) [1], bór-trifluor-éterátot [2] és jódot használtunk. Az első két esetben ismert eljárás alapján állítottuk elő a várt és tervezett származékokat. A jód esetében az előállítás módja sem volt ismert. A N-en nem szubsztituált DHP származékok előállítására egy, az irodalomban ismert módszert alkalmaztunk HIO<sub>3</sub> reagenssel [3].

A sikeres előállítások mellett megállapítottuk, hogy az analóg származékok eltérő fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkeznek, melyek alapján a későbbi reakciók során különböző termékek képződése várható.

[1] J. R. Pfister, *Synthesis*, 1990. **1990**(08): 689-690.

[2] L. D. Guanaes, L.D., et al., *Tetrahedron Letters*, 2015. **56**(15) 2001-2004.

[3] L. Chai, et al., *Tetrahedron Letters*, 2006. **47**(52) 9283-9285.

**Köszönetünket nyilvánítjuk Gáti Tamásnak az NMR mérésekért.**

# HANTZSCH PIRIDÍNIUM SZÁRMAZÉKOK REDUKCIÓS VIZSGÁLATA KÜLÖNBÖZŐ REDUKÁLÓSZERREKKEL

**Bodonyi Simon József<sup>a</sup>, Bogdán Dóra<sup>b</sup>, Barcza Tibor<sup>b</sup>, Herke Klára<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Semmelweis Egyetem Gyógyszerésztudományi Kar, Budapest, Üllői út 26, 1085*

<sup>b</sup>*Semmelweis Egyetem Gyógyszerésztudományi Kar Szerves Vegytani Intézet, Budapest, Hőgyes Endre u. 7, 1092*

A Hantzsch-észterek, vagy másik nevükön 1,4-dihidropiridin (DHP) származékok, enyhe redukálószer. Átmenetifém-mentes transzfer hidrogénezési reakciókban használják őket, aktivált C=C, karbonil csoportok, és iminek telítésére, illetve epoxi vegyületek felnyitására. Ezen vegyületek felhasználásuk során oxidálódnak. Reduktív regenerálásuk megoldása áttörést jelentene az ipari szintézisekben.

Kutatásaink során célul tűztük ki, hogy a kutatócsoportunkban előállított oxidált Hantzsch-észter származékokat a megfelelő 1,4-DHP származékká redukáljuk vissza. A redukciókkal szembeni elvárásunk az, hogy szelektív legyen, és a lehetségesen kialakuló két izomer közül csak 1,4-DHP keletkezzen, míg 1,2-DHP izomer nem.

Az irodalomban ismert, hogy egyes NAD<sup>+</sup> származékok, amelynek analógjai a Hantzsch észterek, Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-al, NaHCO<sub>3</sub> jelenlétében, vizes közegben a megfelelő NADH-vá redukálhatóak. Ezt a hasonlóságot terveztük felhasználni. Azonban a mi vegyületeink olyan funkciós csoportokat tartalmaznak, amelyek miatt az oldhatóságuk eltér a modelltől. Vízben nem oldódnak sem a kiindulási (oxidált), sem a terméként kapott (redukált) származékok, szerves oldószer hozzáadására sem. A redukciót NaBH<sub>4</sub> alkalmazásával végeztük, azonban az esetek döntő részében a nem várt 1,2-izomer keletkezett. A kiindulási piridínium sók ellenionja befolyásolja a keletkező izomer képződést. Hidrogénezéshez három heterogén katalizátort használtunk: Raney Ni-t, Pd/C-t és PdCl<sub>2</sub>-ot. A Raney-Ni és Pd/C esetén a redukció 40 baron sem indult el. PdCl<sub>2</sub> esetén, ha a redukció teljes mértékű is, általában két terméket eredményez, vegyesen a két izomert. Két esetben keletkezett kizárólag 1,2-izomer, amelyek nem ismertek az irodalomban. Ezekre a származékokra egy új kutatási témát tervezünk, mivel ezek részt vehetnek a Diels-Alder cikloaddíciós reakcióban ellentétben az 1,4-izomerekkel. A Bu<sub>3</sub>SnH szerves ón vegyület hidrogén atom forrásként szolgál. Érdekessége, hogy tBu-származékunknál 1,4-izomert eredményezett a redukció, míg hidrogénezéssel 1,2-izomert kaptunk. További kísérleteket tervezünk, hogy ezt optimalizálni tudjuk.

Következtetések: Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, NaBH<sub>4</sub>, Raney-Ni és PdCl<sub>2</sub> segítségével nem kaptuk meg a várt redukált származékokat. A Bu<sub>3</sub>SnH bár drága reagens, kémiai szempontból ígéretesnek tűnik.

# CINKONA-(TIO)NÉGYZETAMIDOK ALKALMAZÁSA FÉMMEEL KOMBINÁLT ORGANOKATALITIKUS REAKCIÓKBAN

**Kis Dávid<sup>a</sup>, Dargó Gyula<sup>a</sup>, Richter Dóra<sup>a</sup>, Németh Réka Helga<sup>a</sup>, Nagy Sándor<sup>a</sup>, Bagi Péter<sup>a</sup>,  
Huszthy Péter<sup>a</sup>, Kupai József<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,  
Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Budapest, Szent Gellért tér 4, 1111*

Napjainkban amennyiben az értékes, enantiomertiszta gyógyszeripari hatóanyag természetes forrásból nem áll rendelkezésre, akkor az illető anyag előállítását aszimmetrikus szintézissel valósíthatjuk meg. Az enantioszelektív reakciók megvalósíthatók aszimmetrikus katalizátorok alkalmazásával, amelyek segítségével csak a számunkra kedvező enantiomer keletkezik. Ezzel elkerülhetővé válik a racém termék rezolválása, és csökkenthető a reakció környezeti faktora.

Kombinálva az organokatalizátorokat valamint az átmeneti fémeket, ezen katalizátorcsaládok hasznos tulajdonságai ötvözhetők, és olyan szelektív kémiai átalakítások is elérhetők, melyek a fém- és organokatalizátorok kombinációja nélkül nem lennének megvalósíthatók. [1–2] Kutatómunkám során célom volt aszimmetrikus hidrogénkötés donor négyzetamid, illetve tionégyzetamid organokatalizátorok előállítása. A katalizátorok királis egységeként a királis készletből ('chiral pool') a széleskörűen alkalmazott cinkona alkaloidok családját választottam. Az előállított cinkona-négyzetamid, illetve -tionégyzetamid organokatalizátort *transz*- $\beta$ -nitrosztirol és acetilaceton *Michael*-addíciós reakciójában alkalmaztam, amely reakcióban kiváló termelést (93%) és enantiomerfelesleget (98% ee) értem el. Munkám során további célom volt az irodalomban eddig még nem ismert cinkona-tionégyzetamid organokatalizátor *in situ* kombinálása átmenetifémekkel (réz, nikkel), és alkalmazása *Michael*-addícióban.

[1] M. Ikeda, Y. Miyake, Y. Nishibayashi, *Angewandte Chemie International Edition* **2010** (49) 7289–7293.

[2] T. P. Le, K. Higashita, S. Tanaka, M. Yoshimura, M. Kitamura, *Organic Letters* **2018** (20) 7149–7153.

A szerzők köszönik az Innovációs és Technológiai Minisztérium Új Nemzeti Kiválóság Programja (ÚNKP-21-2-I-BME-209), a Nemzeti Kutatási és Fejlesztési és Innovációs Hivatal (nyilvántartási számok OTKA-FK138037 and K128473), és a Richter Gedeon Kiválósági PhD Ösztöndíj (Richter Gedeon Talentum Alapítvány) anyagi támogatását.

# **SZERVETLEN ÉS BIOKÉMIA SZEKCIÓ**

## REKOMBINÁNS ENZIMEK SZELEKTÍV RÖGZÍTÉSI LEHETŐSÉGEINEK VIZSGÁLATA

**Alács Bálint<sup>a</sup>, Sánta-Bell Evelin<sup>a</sup>, Molnár Zsófia<sup>a,b</sup>, Hornyánszky Gábor<sup>a</sup>, Poppe László<sup>a,c</sup>**

<sup>a</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves kémia és technológia tanszék, 1111 Budapest  
Műegyetem rkp. 3

<sup>b</sup>Eötvös Lóránd Kutatási Hálózat, Enzimológiai Intézet, Genom Metabolizmus Kutatócsoport, 1117 Budapest  
Magyar tudósok körútja 2.

<sup>c</sup>Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, 400028 Kolozsvár, Arany János utca 11.

Kutatásunk során olyan bifunkciós enzimrögzítésre alkalmas hordozókat állítottunk elő melyek alkalmasak rekombináns hisztidinjelöléssel ellátott enzimek szelektív kovalens rögzítésére a fermentációt és sejtfeltárást követően a fehérjekeverékből. A módszer előnye, hogy előzetes kromatográfiás fehérjetisztítási lépések nélkül egy stabil, kovalensen rögzített biokatalizátort kapunk.

A módszer lényege, hogy a hordozó felületét komplexképző- és epoxifunkciós csoportokat tartalmazó vegyületekkel módosítjuk, majd a komplexképzőhöz átmenetifémek ionjait komplexáltatjuk. A felületi fémekkel a hisztidin jelöléssel ellátott rekombináns enzimek szelektíven komplexet képeznek, majd ezt követően kovalensen kapcsolódnak a hordozó epoxicsoportjain keresztül.

Kutatásunk célja az volt, hogy a kutatócsoportban eddig elért szelektív enzimrögzítéssel kapcsolatos egyes eredményeket [1] kiterjesszük más enzimekre, illetve hordozóra.

Korábban a csoportban mágneses nanorészecskékre sikeresen rögzítettek *Petroselinum crispum* fenilalanin ammónia-liáz (PcPAL) enzimet ezzel a módszerrel.

Kutatásunk során a mágneses nanorészecskék mellett egy pórusos, kereskedelemben kapható PMMA hordozóra vizsgáltuk a PcPAL enzim, *Geobacillus stearothermophilus* lipáz (GsLIP) és *Chromobacterium violaceum* transzamináz (CvTA) rögzítését különböző komplexképző-epoxidegyület keverési arány mellett, valamint a legjobb arányokat alkalmazva kiterjesztettük a bisz- és triszepoxidok körét további kilenc vegyülettel.

A vizsgálataink során azt kívántuk feltárni, hogy a legjobb biokatalitikus aktivitást biztosító funkcióscsoport arányok mennyiben függenek az enzim és mennyiben a hordozó típusától. Ezért is választottunk két igen eltérő hordozót és különböző méretű és szerkezeti összetettségű enzimeket.

[1] E. Sánta-Bell, Z. Molnár, A. Varga, F Nagy, G. Hornyánszky, C Paizs, D. Balogh-Weiser, L. Poppe; *Molecules*, **2019** 24(20) 4146.

## MONENZIN A KÖLCSÖNHATÁSA KÉTÉRTÉKŰ FÉMIONOKKAL

**Hajdu Bálint<sup>a</sup>, Kis Máté Levente<sup>a</sup>, Ivayla Pantcheva<sup>b</sup>, Gyurcsik Béla<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 6720, Szeged, Dóm tér 7.*

<sup>b</sup> *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry and Pharmacy, Sofia University "St. Kl. Ohridski", Sofia, Bulgaria.*

A monenzin A egy természetes antibiotikum, amelyet a *Streptomyces cinnamomensis* baktériumban fedeztek fel 1967-ben [1]. A molekula kvázi gyűrűs szerkezetű a láncvégi hidroxil és kabroxilcsoportok között kialakuló hidrogénhidnak köszönhetően. A belső üregbe képesek egyszeresen pozitív töltésű kationok koordinálódni, ezen tulajdonsága teszi alkalmassá a vegyületet, hogy különböző kationokat szállítson a sejtfalon át és ily módon kifejtsen antibakteriális hatását. A monenzint széleskörűen vizsgálták, az elmúlt években, és számos kristályszerkezet született elsősorban az egyszeres pozitív töltésű kationokkal alkotott komplexeiről, amelyek mind igen nagy hasonlóságot mutatnak. A komplexek tanulmányozhatók Cirkuláris Dikroizmus (CD) spektroszkópiával is és meglepő módon a hasonló szerkezet ellenére jelentős eltérések tapasztalhatók a CD spektrumokban [2].

Kétértékű kationokkal a CD mérések alapján  $[M(\text{Mon})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  és  $[M(\text{Mon})(\text{H}_2\text{O})]^+$  komplexek képződése figyelhető meg, amennyiben a monenzin A belső üregében vízmolekula található [3]. Kutatásunk során célunk, hogy minél több kétértékű átmenetifémionnal vizsgáljuk meg a monenzin kölcsönhatását. Megállapítottuk, hogy a Co(II), Ni(II) és Cu(II) komplexek mind UV, mind látható tartományban rendelkeznek CD effektussal. A Co(II) komplexek oldatkémiai sajátosságait is meghatároztuk metanolos közegben. Emellett vizsgáltuk a különböző átmenetifémionok közti kompetíciót is elsősorban Co(II) és Ni(II) esetében. Arra is kíváncsiak voltunk, hogy az egyértékű fémionokkal alkotott monenzin komplexek kétértékű fémionok jelenlétében alkotnak-e vegyeskomplexeiket, vagy kompetíció során az egyik fémion kiszorul.

[1] A. Agtarap, J. W. Chamberlin, M. Pinkerton, L. K. Steinrauf, *J. Am. Chem. Soc.*, **1967** 5737–5739.

[2] A. Nedzhib, J. Kessler, P. Bouř, B. Gyurcsik, I. Pantcheva, *Chirality*, **2016** 420–428.

[3] I. Pantcheva, A. Nedzhib, L. Antonov, B. Gyurcsik, P. Dorkov, *Inorg. Chimica Acta*, **2020** 1–8.

**AZ INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI MINISZTERIUM ÚNKP-21-3 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL FINANSZÍROZOTT SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.**

# EGY VÍZOLDHATÓ, RÁKELLENES 8-HIDROXI-KINOLIN-AMINOSAV HIBRID ÉS FÉLSZENDVICS RÓDIUM ÉS RUTÉNIUM KOMPLEXEINEK VIZSGÁLATA

**Kovács Hilda**<sup>a,b</sup>, **Pivarcsik Tamás**<sup>a,b</sup>, **Spengler Gabriella**<sup>b,d</sup>, **Szatmári István**<sup>c</sup>, **Enyedy Éva A.**<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, Dóm tér 7, 6720 Szeged, Magyarország

<sup>b</sup> MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, Dóm tér 7, 6720 Szeged, Magyarország

<sup>c</sup> Gyógyszerkémiai Intézet, Szegedi Tudományegyetem, Eötvös u. 6, 6720 Szeged, Magyarország

<sup>d</sup> Orvosi Mikrobiológiai Intézet, Szent-Györgyi Albert Orvostudományi Kar, Szegedi Tudományegyetem, Semmelweis u. 6, 6720 Szeged, Magyarország

A 8-hidroxi-kinolint (HQ) és származékait széles körben vizsgálják biológiai aktivitásuk miatt, egyes származékai antibakteriális, gombaölő és citotoxikus hatásúak [1]. A rákellenes HQ alapvázal rendelkező vegyületek esetén korábban közölték, hogy a 7-es pozícióban lévő -CH<sub>2</sub>-N- egység fokozza az aktivitásukat multidrog rezisztens (MDR) rákos sejtvonalon [2]. A legtöbb HQ származék bioaktivitása a komplexképző képességéből származik.[1] A kutatócsoportunkban több citotoxikus HQ származékot és azok félszendvics ródium és ruténium komplexeit is vizsgáltak már oldategyensúlyi viselkedésük szempontjából.

Jelen munkában a 8-hidroxi-kinolin-L-prolin hibridmolekula (HQNO<sub>2</sub>-Pro) és [Ru(η<sup>6</sup>-p-cimol)(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup> (RuCym) és [Rh(η<sup>5</sup>-C<sub>5</sub>Me<sub>5</sub>)(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup> (RhCp\*) triakva kationokkal képzett komplexeinek előállítását és vizes oldatbeli viselkedésüket mutatjuk be, továbbá biomolekulákkal (humán szérum albumin, ct-DNS) való kölcsönhatásukat is vizsgáltuk. A ligandum és komplexeinek citotoxikus hatását kemoszenzitív és MDR sejtvonalon teszteltük. Méréseink alapján fiziológiás pH-n a ligandum -1 töltésű, ikerionos formában van oldatban, ami kiemelkedő vízdoldhatóságot biztosít. Komplexei szintén hidrofil tulajdonságúak, – ami függ a kloridionok oldatbeli mennyiségétől – továbbá széles pH-tartományban stabilisak. Mindkét komplex hasonlóan nagy affinitást mutat albumin felé, emellett DNS-sel is képesek kölcsönhatást kialakítani. A ligandum és a RhCp\* komplex mind a két sejtvonalon mutatott citotoxicitást és MDR szelektivitást, a RuCym komplex viszont inaktívnak bizonyult.

[1] V. Oliveri, G. Vecchio, *Eur. J. Med. Chem.*, **2016** (120) 252–274.

[2] A. Füredi, Sz. Tóth, K. Szabó, V. F. S. Pape, D. Türk, N. Kucsma, L. Cervenak, J. Tóvári, G. Szakács, *Mol. Cancer Ther.* **2017** (16) 45–56.

# FOSZFIN LIGANDUMOT TARTALMAZÓ OXORÉNIUM(V) ÉS FÉLSZENDVICS RuCp-KOMPLEXEK OLDATKÉMIAI VIZSGÁLATA

Mészáros János Péter<sup>a</sup>, Ana Isabel Tomaz<sup>b</sup>, Jelena Poljarevic<sup>c</sup>, Enyedy Éva Anna<sup>a</sup>

<sup>a</sup>MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Dóm tér 7,  
Szeged, Magyarország

<sup>b</sup>Centro de Química Estrutural and Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências,  
Universidade de Lisboa, Campo Grande 016, 1749-016 Lisszabon, Portugália

<sup>c</sup>University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg. 12-16, 11000 Belgrád, Szerbia

A rák kemoterápiás kezelésére állandó igény van új, szelektívebb vegyületek kifejlesztésére. Számos fémion (pl. Ga(III), Au(I), Ru(II/III)) komplexe biztató citotoxikus hatást mutat rákos sejtvonalakon *in vitro* [1]. A fémorganikus vegyületek közül a ciklopentadienil ligandumot félszendvics elrendezésben tartalmazó RuCp-komplexek *in vivo*, azaz állatmodelleken is hatásosnak bizonyultak [2]. A Re(I)-komplexek szintén rákellenes hatású fémkomplexeket kapunk, emellett vannak antivirális tulajdonságot mutatók is [3-4]. Bizonyos Re(V) komplexek képesek a DNS hasítására [3], emellett oxidációs reakciók katalizátorai is [5], mely reakciókat katalizálhatja akár a szervezeten belül.

Az említett Ru(II)Cp- és Re(V)-komplexek esetében egy közös pont van: egy trifenil-foszfin ligandum kötődik mindkét fémion centrumhoz. A két vegyületcsoport oldatkémiai viselkedése között nagy a különbség, pl. a koordinálódott PPh<sub>3</sub> ligandum oxidációra való érzékenysége, ill. a komplexek stabilitása különböző oldószerekben eltér. Ezeket a különbségeket fogom ismertetni előadásomban, melyek a citotoxicitási értékekre is nagy hatással lehetnek. Az oldatkémiai vizsgálatok mellett a komplexek előállítása és szerkezete is bemutatásra kerül.

[1] E. J. Anthony, et al.; *Chemical Sciences*, **2020** (11) 12888–12917.

[2] L. Gano, et al.; *Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry*, **2019** (10) 1262–1275.

[3] C. Konkankit, et al.; *Dalton Transactions*, **2018** (47) 9934–9974.

[4] J. Karges, et al.; *Angewandte Chemie International Edition*, **2021** (60) 10716–10723.

[5] A. M. Kirillov, et al.; *Advanced Synthesis & Catalysis*, **2005** (347) 1435–1446.

**Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-4-SZTE-493 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.**



## **PLENÁRIS ELŐADÁS II.**

# KUTATÓI KARRIERÉPÍTÉS ÉS BIFUNKCIÓS IMINOFOSZFORÁN SZUPERBÁZIS KATALÍZIS

**Rózsár Dániel<sup>a</sup>, Darren J. Dixon<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Oxfordi Egyetem, Kémia Tanszék, Chemistry Research Laboratory, 12 Mansfield Rd., OX1 3TA, Oxford, UK.

A doktori képzés a kémiai kutatói pálya egyik sarkalatos eleme, amely elkezdése számos kérdés elé állítja a végzős egyetemista hallgatókat, például: *Hová és mikor érdemes jelentkezni? Mi alapján kéne dönteni? Hány helyre érdemes jelentkezni? Mi lesz, ha nem vesznek fel? Mire kell számítani egy interjún?* Manapság a tudományos és hétköznapi élet globalizáltsága jelentősen megkönnyíti a külföldi PhD kurzusokra való jelentkezést, azonban a tapasztalatok szerint ezt a karrierutat számos tévhit övezi.

Az előadás célja a külföldi doktori képzéssel és kutatómunkával kapcsolatos kollektív és személyes tapasztalatok ismertetése, továbbá az Oxfordi Egyetemen belül, a Dixon csoportban végzett aszimmetrikus bifunkciós iminofoszfórán szuperbázis katalízis bemutatása és szemléltetése gyakorlati példákon keresztül [1-4].

- [1] M. G. Núñez, A. J. M. Farley, D. J. Dixon; *Journal of the American Chemical Society*, **2013** (135) 16348-16351.
- [2] M. Formica, D. Rozsar, G. Su, A. J. M. Farley, D. J. Dixon; *Accounts of Chemical Research*, **2020** (53) 2235-2247.
- [3] G. Su, C. J. Thomson, K. Yamazaki, D. Rozsar, K. E., Christensen, T. A. Hamlin, D. J. Dixon; *Chemical Science*, **2021** (12) 6064-6072.
- [4] D. Rozsar, M. Formica, K. Yamazaki, T. A. Hamlin, D. J. Dixon; *ChemRxiv*, **2021** <https://doi.org/10.26434/chemrxiv.14355422.v1>.

**D. R. köszöni az EPSRC Centre for Doctoral Training in Synthesis for Biology and Medicine (EP/L015838/1) programnak a posztgraduális ösztöndíj biztosítását, amelyet nagylelkűen finanszíroz az AstraZeneca, Diamond Light Source, Defence Science and Technology Laboratory, Evotec, GlaxoSmithKline, Janssen, Novartis, Pfizer, Syngenta, Takeda, UCB és Vertex.**



## **SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ II.**

## POLI(ETILÉN-TEREFTALÁT) LEBONTÁSÁNAK OPTIMALIZÁLÁSA SZILÁRD HORDOZÓHOZ RÖGZÍTETT ORGANOKATALIZÁTOROKKAL

**Kiss Johanna<sup>a</sup>, Fehér Zsuzsanna<sup>a</sup>, Kisszékelyi Péter<sup>a</sup>, Nagy Sándor<sup>a</sup>, Kárpáti Levente<sup>b</sup>, Huszthy Péter<sup>a</sup>, Kupai József<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.*

<sup>b</sup>*Downstream Hungary, Polyolefin R&D, MOL Nyrt.*

Napjainkban a műanyagok újrahasznosítása rendkívül fontos, mind a környezetszennyezés csökkentése, mind pedig a meg nem újuló energiaforrások megtakarítása érdekében. A poli(etilén-tereftalát) (PET) egy széleskörben, főként csomagolóhoz felhasznált, biológiailag nem lebomló polimer, így nagymértékben hozzájárul a Földünk szennyezéséhez.

Munkám során használt PET-palackokból készült örlemény depolimerizációját glikolízissel valósítottuk meg, mely során az etilén-glikol nemcsak a reagens, de az oldószer szerepét is betölti. A reakció végterméke a PET egyik monomere, a bisz(2-hidroxi-*etil*)-tereftalát (BHET), amelyből a polimer újbóli előállítása is megvalósítható. Katalizátorként három kereskedelmi forgalomban kapható, szilikagélhez rögzített organokatalizátort és egy általunk előállított 1,5,7-triazabicyclo[4.4.0]dec-5-énnel (TBD) módosított szilikagélt alkalmaztunk. A szilikagél szilárd hordozó előnye, hogy egy egyszerű szűréssel lehetővé teszi a katalizátor visszaforgatását, ezzel fenntarthatóvá téve a folyamatot. A glikolízis körülményeinek optimalizálása érdekében, előzetes paramétervizsgálat után egy  $2^{4-1}$  részfaktoros kísérleti tervet dolgoztunk ki, az irodalomban leggyakrabban vizsgált négy faktor, azaz a hőmérséklet (170–190 °C), a katalizátormennyiség (5–20 mol%), az etilén-glikol-felesleg (10–15 ekv.) és a reakcióidő (1–2 óra) felhasználásával. A kísérleti terv eredményeit a *Statistica* program segítségével értékeltük ki. Az optimális reakciókörülményeket a BHET-termelésre felállított, szignifikáns hatásokat tartalmazó redukált modellből *Box–Wilson*-féle gradiens módszer segítségével határoztuk meg. A reakció optimális körülményei között kiváló, 89%-os nem-izolált, illetve 85%-os preparatív BHET-termelést tudtunk elérni. Emellett a legjobbnak bizonyuló, trialkil-aminnal módosított szilikagél (Si-TEA) katalizátort sikeresen visszanyertük, és 4 ciklusban visszaforgattuk.

A szerzők köszönik az OTKA (FK138037, K128473), a Bolyai János Kutatói Ösztöndíj, az Új Nemzeti Kiválóság Program ÚNKP-20-5-BME-322 (KJ), ÚNKP-21-3-I-BME-311 (FZs), és a Richter Gedeon Talentum Alapítvány anyagi támogatását.

# LIPOFIL CINKONA ORGANOKATALIZÁTOR SZINTÉZISE, ALKALMAZÁSA ÉS VISSZANYERÉSE

**Molnár Balázs<sup>a</sup>, Dargó Gyula<sup>a</sup>, Kisszékelyi Péter<sup>a</sup>, Fehér Zsuzsanna<sup>a</sup>, Huszthy Péter<sup>a</sup>, Kupai József<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.*

Napjaink vegyiparában az organokatalizátorok visszaforgatása mind a fenntarthatóság mind a gazdaságosság szempontjából kiemelkedő jelentőséggel bír. Ennek megoldására számos módszer létezik, ezek egyike a reakcióelegy komponensei közötti oldhatósági különbségek kihasználása. A hatékony, mégis egyszerű visszaforgatás megvalósítása érdekében lipofil oldallánc építhető be az organokatalizátor molekulára [1]. Ezáltal annak polaritása jelentősen eltérő lesz a reaktánsokétól, és ezt kihasználva a homogén katalitikus reakció lejátszódása után, egy oldószerváltást követően egy egyszerű szűrési vagy centrifugálási lépéssel visszanyerhető a katalizátor.

A kutatómunkánk célja egy – korábban már sikerrel alkalmazott [2] – cinkona-négyzetamid típusú organokatalizátor visszaforgatásának megvalósítása volt lipofil oldallánc bevitelével. Ehhez először előállítottunk egy három oktaedecilcsoportot tartalmazó karbonsavszármazékot, amelyet aztán egy savamidképzési reakcióval rögzítettünk a cinkona-négyzetamid katalizátorhoz egy előzőleg beépített aminoetil linkerrel keresztül. Az így nyert lipofil organokatalizátor hatékonynak bizonyult *Michael*-addíciós próbareakciókban, kitűnő termelést és enantioszelektivitást értünk el vele. Oldószer screeninget is végeztünk annak érdekében, hogy megállapítsuk, a katalizátor mely olyan apoláris oldószerekben alkalmazható hatékonyan, melyek a zöld kémia követelményeinek is megfelelnek. A katalizátor visszanyerése a reakcióelegyből annak lipofil karakterét kiaknázva valósítható meg.

[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.

**A szerzők köszönik az Innovációs és Technológiai Minisztérium Új Nemzeti Kiválóság Programja (ÚNKP-21-1-I-BME-172), a Nemzeti Kutatási és Fejlesztési és Innovációs Hivatal (nyilvántartási számok OTKA-FK138037 and K128473), és a Richter Gedeon Kiválósági PhD Ösztöndíj (Richter Gedeon Talentum Alapítvány) anyagi támogatását.**

# FUNKCIONALIZÁLT, GYŰRŰS ALKILAMINO-KARBÉNEK SZINTÉZISE ÉS RUTÉNIUMKOMPLEXEINEK FELHASZNÁLÁSA OLEFINEK METATÉZISÉBEN

Nagyházi Márton<sup>a</sup>, Turczel Gábor<sup>a</sup>, Balla Áron<sup>a</sup>, Szálas Gábor<sup>a</sup>, Tóth Imre<sup>b</sup>, Gál Tamás Gyula<sup>c</sup>, Bombicz Petra<sup>c</sup>, Paul T. Anastas<sup>d</sup>, Tuba Róbert<sup>a</sup>

<sup>a</sup>ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Zöldkémia Kutatócsoport, 1117 Budaest, Magyar tudósok körútja 2.

<sup>b</sup>Pannon Egyetem, Kémia Intézet, 8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

<sup>c</sup>ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Kémiai Kristallográfiai Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

<sup>d</sup>Center for Green Chemistry and Engineering, CT-06511 New Haven, Prospect Street 370, Amerikai Egyesült Államok

A katalitikus célú ligandumfejlesztés az utóbbi három évtizedben a karbének felé fordult, mert számos eljárásához lényegesen kedvezőbb elektronikus sajátságokkal rendelkeznek, mint az aminok vagy a foszfinok [1-2]. Ez a fejlesztő munka a Grubbs-típusú, Ru-alapú olefin metatézis katalizátorok fejlesztésében mutatkozott meg: az első generációs fajta még foszfint [3], az újabbak már karbént tartalmaznak, és nagyobb aktivitást mutatnak [4].

Kutatócsoportunk karbénligandumok fejlesztésével foglalkozik. Megvalósítottuk a karbének egy új típusának, a gyűrűs alkilamino-karbéneknek (CAAC) [5] szintézisét oly módon, hogy azok *tercier*-aminocsoport, illetve *kvaterner*-ammóniumcsoport funkciót tartalmazzanak. Ezzel a módosítással lehetőség nyílik a karbénligandum elektronikus sajátságainak és a keletkező komplex polaritásának szabályozására. A ligandummal előállítottuk a Grubbs és a Hoveyda-Grubbs-típusú komplexekkel analóg szerkezetű Ru-vegyületeket, szerkezetüket NMR- és XRD-vizsgálatokkal elemeztük. Az új komplexek katalitikus aktivitását olefinek metatézisreakcióiban vizsgáltuk. A katalízis poláros, akár prótikus oldószerben is működőképesnek bizonyult – már 0,05 mol% katalizátortöltet mellett is [6].

[1] D. Munz; *Organometallics*, **2018** (37) 275-289.

[2] J. P. Moerdyk, C. W. Bielawski; *Contemporary Carbene; Stable Carbenes Chemistry*, **2013**, 40-74

[3] P. Schwab, M. B. France, J. W. Ziller, R. H. Grubbs; *Angewandte*, **1995** (34) 2039-2045.

[4] M. Scholl, T. M. Trnka, J. P. Morgan, R. H. Grubbs; *Tetrahedron Letters*, **1999** (40) 2247-2250

[5] M. Soleilhavoup, G. Bertrand; *Accounts of Chemical Research*, **2015** (48) 256-266.

[6] M. Nagyházi, G. Turczel, Á. Balla, G. Szálas, I. Tóth, Gy. T. Gál, P. Bombicz, P. T. Anastas, R. Tuba; *ChemCatChem*, **2020** (12) 1953-1957.

## FÉMION-KELÁTOR FLUORESZCENS SZENZORMOLEKULÁK SZINTÉZISE

**Pantl Orsolya<sup>a</sup>, Csomos Attila<sup>a,b</sup>, Kovács Ervin<sup>a, c</sup>, Mucsi Zoltán<sup>a,f</sup>, Rózsa Balázs<sup>a,f</sup>,  
Katona Gergely<sup>d</sup>, Cseri Levente<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Femtonics Kft., Kémia Osztály, 1094 Bp, Tűzoltó u. 58.*

<sup>b</sup>*Eötvös Loránd Tudományegyetem Hevesy György Kémia Doktori Iskola, 1117 Bp, Pázmány Péter stny. 1/A*

<sup>c</sup>*Természettudományi Kutatóközpont, Polimer Kémiai Kutatócsoport, 1117 Bp, Magyar tudósok körútja 2*

<sup>d</sup>*Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Információs Technológiai és Bionikai Kar,*

*Két-Foton Méréstechnológiai Kutatócsoport, 1083 Bp, Práter u. 50/A.*

<sup>e</sup>*Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézet, Ideghálózatok és Dendritikus Integráció 3D Funkcionális Képző Laboratórium, 1083 Bp, Szigony utca 43.*

<sup>f</sup>*Miskolci Egyetem, Műszaki Anyagtudományi Kar, Kémia Tanszék, 3315 Miskolc Egyetem út 1. A*

A különböző fémionok in vitro és in vivo kimutatása igen fontos, mert ezek az élő szervezetekben gyakran esszenciális szerepet töltenek be, például a  $\text{Ca}^{2+}$  - és  $\text{Zn}^{2+}$  -ion [1]. A fémionok fluoreszcenciás nyomon követésének elve azon alapszik, hogy a szenzormolekulák önmagukban nem mutatnak jelentős fluoreszcenciát, azonban fémionok jelenlétében olyan szerkezeti, konformációs vagy elektronikus változások mennek végbe a molekulában, amelyek komoly fluoreszcenciajel erősödést eredményeznek. Szenzormolekulánk tervezésénél a zöld fluoreszcens protein (GFP, green fluorescent protein) kromofórjának szerkezetéből a p-HOBDI-ből ((5-(4-hidroxi-benzilidén)-2,3-dimetil-3,5-dihidro-4H-imidazol-4-on) indultunk ki. A GFP kromofór a fehérje környezet nélkül alacsony fluoreszcens intenzitással rendelkezik, ezt azonban különböző szubsztituensekkel jól lehet növelni [2]. Az irodalomban számos analógját írták le, viszont legtöbbször az imidazol-4-on 5-ös pozíciójában módosították. Kutatócsoportunkban korábban a 2-es helyzet szubsztituálását vizsgálták. Az ott található metil csoport anilinnel helyettesítve a fluoreszcens maximum intenzitását és hullámhosszát növeli [3].

Munkám során fémionok kimutatására alkalmas vegyületek szintetizálására tettem kísérletet az imidazol-4-on 2-es és 5-ös pozíciójának módosításával. A szintézis sor kiindulási alapanyaga a tiohidantoin volt, melyet metilezés után a megfelelő aminnal reagáltattam egy one-pot reakcióban a 2-es pozíció szubsztituálása érdekében. Ezután pedig egy Knoevenagel-kondenzációval vittem be 5-ös pozícióba különböző benzilidén csoportokat, ezzel előállítva a fémion szenzort. Az így kapott különböző GFP kromofór származékokkal a későbbiekben fémionok kimutatását, kvantifikálását, és biológiai rendszerekben történő nyomon követését tervezzük megvalósítani.

[1] K. P. Carter, A. M. Young, A. E. Palmer; *Chemical reviews*, 2014, (114) 4564–4601.

[2] C. L. Walker, K. A. Lukyanov, I. V. Yampolsky, A. S. Mishin, A. S. Bommarius, A. M. Duraj-Thatte, B. Azizi, L. M. Tolbert, K. M. Solnsteve; *Current opinion in chemical biology*, 2015, (27)64–74.

[3] A. Jancsó, E. Kovács, L. Cseri, B. J. Rózsa, G. Galbács, I. G. Csizmadia, Z. Mucsi; *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2019, (218) 161–170.

## AZ UHLE-KETON, EGY ERGOT ALKALOID LEHETSÉGES, ÚJ SZINTÉZISE

**Szabó Dávid<sup>a</sup>, Bogdán Dóra<sup>b</sup>, Barcza Tibor<sup>b</sup>, Herke Klára<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar,  
Kémia Intézet, Budapest, Pázmány Péter sétány 1/a, 1117*

<sup>b</sup>*Semmelweis Egyetem Gyógyszerésztudományi Kar,  
Szerves Vegytani Intézet, Budapest, Hőgyes Endre u. 7, 1092*

Az Uhle-ke-ton egy triciklusos, indolvázat tartalmazó vegyület, melyet az ipar előszeretettel használ intermediereként ergoline-vázat tartalmazó – többek között ergometrin, lizergsav – célvegyületek szintézisé-nél. Az irodalomban található szintézisutak [1,2] közös jellemzője, hogy már az első lépések között az általuk preferált indol-, indolin-származékokat használják; ismert tény, hogy a legtöbb indol-származék érzékeny savakra és/vagy oxigénre 3-as szénatomjának reaktivitása miatt, mely reaktivitást – elektrofil támadást feltételezve –  $10^{13}$ -szorosra becsülik az aromás rendszerek reaktivitásával összevetve. Jelen munkánkban az Uhle-ke-ton előállítására teszünk javaslatot olyan szintézisutat alkalmazva, mely nagy részében mellőzi a már említett származékok felhasználását, az indol-képző reakciót csak a szintézisút második részében hajtja végre a molekulán. Munkánkat két részre bontjuk, az első részben egy biciklusos hidrazon-származék előállítására összpontosítunk. Szintézisünk a kereskedelem-ben kapható 4-klórbutirofenon nitrálásával indul, melyet a kapott termék védelme követ. A harmadik lépésben a klórt katalitikus mennyiségű kálium-jodid jelenlétében Finkelstein-reakcióval jódra cseréljük, majd az így kapott haloke-ton-származékot alkilezzük dietil-malonáttal. Redukálást követően gyűrűt zárunk, megkapva így első részünk célvegyületét. Munkánk második fázisában az előzetesen előállított arilhidrazont további 6 lépéssel tervezzük Uhle-ke-tonná alakítani. A munka során vizsgáljuk, hogy elhagyható-e a ketálos-védelem, továbbá tervezzük a redukciós lépés végrehajtását többféle redukálószer segítségével. Az ily módon előállított vegyületek mind ismeretlenek az irodalomban, így érdeklődésre adhatnak okot nem csak az általunk tervezett szintézisutak kapcsán.

[1] I. Moldvai, E. Temesvári-Major, M. Incze, É. Szentirmay, E. Gács-Baitz, Cs. Szántay, *The Journal of Organic Chemistry*, **2004** 69 (18), 5993-6000

[2] E. C. Kornfeld, E. J. Fornefeld, G. Bruce Kline, M. J. Mann, D. E. Morrison, R. G. Jones, R. B. Woodward, *Journal of the American Chemical Society*, **1956** 78 (13), 3087-3114

**Köszönetünket nyilvánítjuk Gáti Tamásnak a NMR-mérésekért.**



## ELEMI KÉN ALKALMAZÁSA MULTIKOMPONENSŰ REAKCIÓKBAN

**Szabó Renáta<sup>a,b</sup>, Németh András György<sup>a,b</sup>, Keserű Gyögy Miklós<sup>a,b</sup>,  
Ábrányi-Balogh Péter<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>*Természettudományi Kutatóközpont, Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, 1117 Budapest Magyar Tudósok krt. 2.*

<sup>b</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,  
1111 Budapest Műegyetem rakpart 3.*

Napjainkban kiemelten fontos szerepe van a környezetbarát és fenntartható szerves szintetikus módszerek fejlesztésének. Ennek egyik eszköze a multikomponensű reakciók alkalmazása, melyekkel összetett szerkezetek állíthatók elő akár egy preparatív lépésben, ezáltal alkalmasak lehetnek atomhatékonyabb és biztonságosabb alternatívát nyújtani, mint a korábban kidolgozott szintetikus eljárások [1,2]. A természetben nagy mennyiségben előforduló, nem toxikus és könnyen kezelhető elemi kén szerves szintézisekben való felhasználása pedig segít kiváltani veszélyes, mérgező reagenseket, illetve fokozni a reakciók atomhatékonyosságát [3].

Munkám során kidolgoztam egy új pszeudo-multikomponensű reakciót akrilamid-származékokból és elemi kénből kiindulva poliszulfán intermediereken keresztül alifás tiolok szintézisére. A reakció optimalizálása során megállapítottam, hogy a poliszulfánok előállításának kritikus paramétere a bázis minősége, amely a reakció szelektivitását alapvetően befolyásolja. A multikomponensű eljárást többféle, széles szerkezeti diverzitású akrilamid-származékokra is kiterjesztettem és a nagyfokú funkciós csoport toleranciának köszönhetően jó hozammal állítottam elő az alifás tiolokat. A tiolok szintézisét további szubsztitúciós, addíciós és oxidációs *egy-üst* reakciókkal kapcsoltam össze. Az irodalomban még nem ismert vegyületek szerkezetét <sup>1</sup>H NMR és <sup>13</sup>C NMR segítségével jellemeztem. A kutatócsoport tervei között szerepel az új eljárással egy forgalomban lévő gyógyszerhatóanyag, a kaptopril előállítása is.

Emellett továbbfejlesztettem egy irodalomban ismert, fahéjaldehidből és elemi kénből kiinduló tiofén-származék előállítására szolgáló eljárást, és az irodalomban leírt termelést jelentősen megnöveltem.

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

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

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

A kutatómunka az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-2-II-BME-276 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával valósult meg.

## ENGLISH SECTION

# STABILIZATION AND FLOCCULATION IN THE COLLOIDAL SYSTEM CONTAINING ALGINIC ACID AND KAOLINITE

**Ewelina Godek<sup>a</sup>, Elżbieta Grządka<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Department of Radiochemistry and Environmental Chemistry, Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, Pl. M. Skłodowskiej-Curie 3, 20-031 Lublin*

Alginic acid (AA) is a negatively charged biopolysaccharide, a copolymer of mannuronic acid and guluronic acid linked by a  $\beta$ -1,4 glycosidic bond. This compound is obtained mainly from marine algae, most often brown algae. It is also produced by some species of bacteria: *Azotobacter vinelandii* and *Pseudomonas fluorescens* [1]. Together with its salts (alginates) are used in food industry mainly as a thickener and emulsifier. Alginic acid be found under the number E400. Moreover, alginic acid due to its gelling properties, is used in food products (jams, jellies) and cosmetics (shampoos, toothpaste, soaps) [2].

Kaolinite (KT) is a natural clay mineral from the group of silicates. KT is a component of kaolin (soft plastic rock, one of the most important raw materials of noble ceramics) [3]. It is widely used as the basic raw material of the fine ceramics industry (porcelain, porcelain, faience) for the production of rubber, paper, paints and cosmetics. In the pharmaceutical industry it is used as an adsorbent [4].

Colloidal systems containing dispersed clay minerals could find many potential industrial applications, but unfortunately are not long-term stable. A solution to this problem may be to add substances of high molecular weight to the system. However, it should be remembered that polymers can stabilize and flocculate the system [5]. Literature data do not contain properties information of mixtures between alginic acid and kaolinite, which is why it is a topic worth paying attention to. Other one is high application potential of such research.

In the experimental part, the influence of AA on the stabilizing and flocculating properties of aqueous KT suspensions was investigated. The research used the UV-VIS spectrophotometric method. The stability mechanism was determined on the basis of adsorption studies.

[1] X. Guo, Y. Wang, Y. Qin, P. Shen, Q. Peng, *International Journal of Biological Macromolecules*, **2020** 162 618-628.

[2] Y. Qin, J. Jiang, L. Zhao, J. Zhang, F. Wang, *Applications of alginate as a functional food ingredient*, Academic Press, **2018** Cambridge.

[3] H. Zadvernyuk, V. Kadoshnikov, S. Shekhunova, S. Remez, *Applied Clay Science* **2021** 213 106236.

[4] K.G. Bhattacharya, S.S. Gupta, *Advances in Colloid and Interface Science* **2008** 140(2) 114-131.

[5] T. Sato, R. Ruch, *Stabilization of colloidal dispersion by polymer adsorption*. Marcel Dekker Inc, **1980** New York.

# THE SYNTHESIS OF CALCIUM PHOSPHATE BASED MATERIALS FOR ENVIRONMENTAL AND BIOMEDICAL PURPOSES USING EGGSHELLS

Marta Kalbarczyk<sup>a</sup>, Aleksandra Szcześ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Department of Interfacial Phenomena, Institute of Chemical Sciences, Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University in Lublin, Sq. M. Curie-Skłodowska 3, 20-031 Lublin, Poland*

Due to the growing demand for biocompatible, bioavailable and bioresorbable materials, new and effective methods for the synthesis of calcium phosphate bioceramics have been developed [1]. A major component of human hard tissue, hydroxyapatite (HA), is considered as a material of a great potential for medical, environmental and agricultural purposes [2]. The natural material being the product of the biomineralization process possesses characteristic properties and composition. It was also widely proved that the biphasic calcium phosphate materials (BCP) composed of both calcium phosphates forms: HA and  $\beta$ -TCP, combines the beneficial properties of both forms [3].

The use of common biowaste- eggshells as a calcium donor during hydrothermal synthesis procedure is beneficial due to the economical and environmental aspects [1,4]. The reduction of energy input is also a crucial factor determining the application of the procedure on a commercial scale.

In the presented research, the environmentally friendly procedure with the use of raw, uncalcined eggshells as the calcium ions precursor was analysed. The material was obtained at various initial pH values and analyzed by means of the SEM, XRD and FTIR techniques. The microwave irradiation during the synthesis was also employed and the changes in the composition and morphology of the obtained materials were underlined.

The materials were also examined in the terms of biomedical applications as a enrichable additive to mouth daily care products supporting the biomineralization process. In this purpose the calcium ions release profiles were determined in the ultrapure water as well as in the Artificial Human Saliva solution. Then, the copper ions adsorption process on the chosen product was studied through fitting obtained data to the most common adsorption models including Langmuir and Freundlich concepts.

[1] A. Szcześ, L. Hołysz, E. Chibowski, *Advances in Colloid and Interface Science*, **2017** (249) 321–330.

[2] M. Akram, R. Ahmed, I. Shakir, W.A.W. Ibrahim, R. Hussain, *Journal of Materials Science*, **2014** (49) 1461–1475.

[3] K. Deng, H Chen, W Dou, Q Cai, X Wang, D. Wang, *Materials Technology*, **2021** (0) 1–8.

[4] N. Eliaz, N. Metoki, *Materials*, **2017** (10) 334.

# INVESTIGATION OF A LED-UV/ClO<sub>2</sub> SYSTEM APPLIED TO THE DEGRADATION OF PHENOL IN WATER

**Daniele Scheres Firk<sup>a</sup>, Tünde Alapi<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, H-6720 Szeged, Dóm tér 7*

Chlorination is used in water treatment plants (WTP) in different treatment stages, as in the oxidation of organic matter and disinfection. The first source of chlorine used in these processes were free available chlorine (FAC) species, which are formed by the solubilization of Cl<sub>2</sub> in water [1]. The greatest problem of FAC is the formation of chlorinated compounds. To reduce the formation of these by-products, less reactive chlorine sources have been used, such as chlorine dioxide (ClO<sub>2</sub>). The reactivity of ClO<sub>2</sub> is modified with exposure to UV radiation in processes known as UV/ClO<sub>2</sub>, in which ClO<sub>2</sub> is irradiated with UV radiation and originates reactive species [2]. The main purpose of this work is to investigate the decomposition of ClO<sub>2</sub> in a LED-UV reactor and apply this process in the degradation of phenol. Initially, the decomposition of ClO<sub>2</sub> was investigated at different photon fluxes ( $9.12 \times 10^{-6}$ ,  $1.26 \times 10^{-5}$ , and  $1.85 \times 10^{-5}$  einstein L<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>), pH (3, 5.5, and 8), and ClO<sub>2</sub> concentration (8, 14, and 20 mg L<sup>-1</sup>), and it was shown to vary greatly in the investigated conditions: the most common observed profile was an exponential decay, but an induction period was observed at pH 3. Using an oxidant/phenol ratio of 20, the removal of total phenolic compounds exceeded 80 % at all investigated conditions, and the organic carbon removal increased with the pH, reaching 43% after 60 minutes at pH 8. An increase in the percentage of remaining adsorbable chlorinated compounds suggested that chlorinated by-products are resistant to the degradation. FAC species were observed during the reactions and can account for the formation of the halogenated by-products. The LED - UV/ClO<sub>2</sub> process was advantageous for the removal of phenol if compared to the direct oxidation with ClO<sub>2</sub>, but this process still needs to be improved to reduce the final concentration of chlorinated by-products.

[1] B.& Veatch, Corporation, *White's Handbook of Chlorination and Alternative Disinfectants*, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, **2010**.

[2] F. Tian, W. Ye, et al. *Chemical Engineering Journal*, **2020** (398) (2020) 125570.

**This work was supported by the János Bolyai Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences, and the New National Excellence Program of the Ministry for Innovation and Technology (UNKP-21-5-SZTE-594), and sponsored by the National Research, Development and Innovation Office-NKFI Fund OTKA, project number FK132742. The authors are grateful to Tempus Public Foundation for the Stipendium Hungaricum scholarship program.**

## BIOCOMPATIBLE AND BIODEGRADABLE ALIPHATIC POLYESTER FOR DRUG DELIVERY APPLICATION

**Mohamed M. Abdelghafour<sup>a,b</sup>, Ágoston Orbán<sup>a</sup>, Ágota Deák<sup>a</sup>, Łukasz Lamch<sup>c</sup>, Eszter Farkas<sup>d</sup>, Ferenc Bari<sup>d</sup>, László Janovák<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> University of Szeged, Department of Physical Chemistry and Materials Science, H-6720, Rerrich Béla tér 1, Szeged, Hungary

<sup>b</sup> Department of Chemistry, Faculty of Science, Zagazig University, Zagazig 44519, Egypt

<sup>c</sup> Department of Organic and Pharmaceutical Technology, Faculty of Chemistry,

Wrocław University of Science and Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Poland

<sup>d</sup> Department of Medical Physics and Informatics, Faculty of Medicine & Faculty of Science and Informatics, University of Szeged, H-6720 Szeged, Korányi fasor 9, Hungary

Due to their preferred biodegradability and biocompatibility features, aliphatic polyesters are one of the most important groups of biodegradable synthetic polymers in research related to biomedical applications such as drug delivery systems (DDS) and artificial implants in tissue engineering [1,2]. Using biocompatible and biodegradable polymers as a drug delivery system (DDS) has numerous advantages to protect the drug from *in vitro* and *in vivo* degradation, enhance therapeutic efficacy, adjust the releasing process, prolong drug activity, and reduce side effects and frequency of administration [3]. The study aims to prepare poly(ethylene succinate) (PES) nanoparticles as a promising DDS to reduce the adverse side effect of calcium channel blocker Nimodipine (NIMO) as antispasmodic and enhance the bioavailability of this poorly water-soluble drug, PES with different molecular weights was synthesized by direct condensation polymerization between succinic acid and ethylene glycol. Based on XRD measurements, encapsulation of NIMO within PES reduces the crystallinity of the drug and also enhances the stability of the encapsulated form in an aqueous media, resulting in increased bioavailability of poor water-soluble NIMO. Eventually, drug release can be controlled by changing the molecular weights of PES as demonstrated by *in vitro* drug release experiments.

[1] D. Bikiaris, V. Karavelidis, E. Karavas; *Curr. Drug Deliv.*, **2009** (6) 425–436.

[2] I. Manavitehrani, A. Fathi, H. Badr, S. Daly, A. N. Shirazi, F. Dehghani; *Polymers*, **2016** (8) 20–52.

[3] P. Couvreur, C. Vauthier; *Pharm. Res.* **2006** (23) 1417–1450.

**This research was financially supported by the Hungarian Scientific Research Fund (OTKA) K134334 as well as the National Research, Development and Innovation Office (GINOP-2.3.2-15-2016-00013). Also, it was supported by the UNKP-20-5, and UNKP-21-4-SZTE-510, New National Excellence Program of the Ministry for Innovation and Technology from the source of the National Research, Development and Innovation Fund and by the János Bolyai Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences.**

## IONIC STRENGTH DEPENDENT INTERMOLECULAR STRUCTURE ALTERATION OF A HPAM POLYMER USED IN ENHANCED OIL RECOVERY

Zsófia Árok<sup>a</sup>, Szilárd Sáringer<sup>a</sup>, Ádám Juhász<sup>a</sup>, Coline Bretz<sup>b</sup>, Sándor Puskás<sup>c</sup>, Márta Dömök<sup>c</sup>, István Szilágyi<sup>a</sup>

<sup>a</sup>MTA-SZTE Lendület Biocolloids Research Group, University of Szeged, H-6720 Szeged, Hungary

<sup>b</sup>LS Instruments AG, CH-1700 Fribourg, Switzerland

<sup>c</sup>MOL Hungarian Oil & Gas Plc, H-6701 Szeged, Hungary

Partially hydrolysed polyacrylamide (HPAM) polymers are widely applied to recover residual oil from reservoirs during polymer flooding processes in enhanced oil recovery (EOR). Although this technique showed good efficiency in oil fields of mild environmental conditions, harsh circumstances, such as elevated temperature and high salinity, may adversely affect the performance of the polymers [1]. In the present research, physico-chemical features of Flopaam 3630, a HPAM polymer frequently used in EOR, were investigated with various techniques at different temperatures and salt concentrations. Dependence of the hydrodynamic radii and dynamic viscosities on the ionic strength shed light on the fact that the polymer adopted an extended conformation at high salt levels, in line with findings recently reported in the literature [2]. The possible intermolecular interactions between the polymer chains were explored by rheology in both rotational and oscillatory modes under different experimental conditions. It was shown that the rheological properties of the polymer solutions change significantly at 1 g/L salinity. Accordingly, the observed pseudoplastic behaviour indicated remarkable intermolecular interactions below this threshold value, while tendencies in the parameters of the flow curves as well as in the storage and loss modulus clearly confirmed the breakup of such a coherent (gel-like) structure above 1 g/L salt concentration. Therefore, the solution behaviour of Flopaam 3630 could be described by considering the presence of individual macromolecule chains without formation of hydrogel structure at elevated salt levels. These results were further underpinned in modulated 3D cross-correlation light scattering and electrokinetic measurements performed at different salt levels. The above findings provide valuable information for the applicability of the Flopaam 3630 polymer during EOR processes in oil reservoirs of various salinity.

[1] K. Liang, P. Han, Q. Chen, Xin Su, Y. Feng, *ACS Omega*, **2019** (4) 10620-10628.

[2] A. M. Smith, A. A. Lee, S. Perkin; *Journal of Physical Chemistry Letters*, **2016** (12) 2157-2163.

[3] F. Swiecinski, P. Reed, W. Andrews. *SPE Improved Oil Recovery Conference*, **2016** SPE-179558

**This work was financially supported by the GINOP-2.3.4-15-2020-00006 project.**

## DESIGN OF AN ANTIOXIDANT HYBRID CATALYST

**Katalin Bere<sup>a</sup>, Nizar B. Alsharif<sup>a</sup>, István Szilágyi<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>MTA-SZTE Lendület Biocolloids Research Group, University of Szeged, H-6720, Szeged, Hungary.

Natural enzymes are important catalysts under specific conditions; however, their production and purification are expensive and time-consuming process [1]. Besides, they suffer from inherent instability, and therefore they operate under mild conditions - for example appropriate pH, temperature and pressure are required [2]. Deviation from the optimal conditions can cause denaturation in protein structures, and because of the damage, the catalytic activity ceases [3]. For these reasons artificial enzymes have been developed – they also have similar catalytic activity as the proper natural enzyme.

During our project we worked on the preparation of an antioxidant hybrid material by controlled heteroaggregation of manganese oxide nanoparticles (MnNPs) and sulfate functionalized polystyrene latex (SL) beads. The negatively charged MnO<sub>2</sub> NPs were prepared by controlled precipitation and we studied their colloidal stability at different pH values and ionic strengths. Thereafter we functionalized the nanoparticles with poly(diallyldimethylammonium chloride) (PDADMAC) polyelectrolyte. The mixing of the MnNPs with PDADMAC induced charge reversal allowing decoration of oppositely charged SL surfaces.

The PDADMAC-functionalized MnO<sub>2</sub> NPs (PMn) were aggregated to the surface of SL particles. During the process the increasing amount of the MnNP-PDADMAC led to negative, neutral and positively charged MnNP-PDADMAC-SL composite. At charge neutralization, we observed unstable dispersions, while in the positive and the negative regions stable composites were observed, which showed significant CAT and SOD activities.

The main result of our work was the development of a complex composite with a high colloidal and structural stability, which had remarkable antioxidant activity even after heat treatment in contrast to natural enzymes.

[1] Y.H. Lin, J.S. Ren, X.G. Qu; Catalytically active nanomaterials; *Accounts of Chemical Research* **2014** 47(4) 1097-1105.

[2] X. Ma, A.C. Hortelao, T. Patino, S. Sanchez; *ACS Nano* 2016 10(10) 9111-9122.

[3] P. Rouster, M. Pavlovic, S. Saringer, I. Szilagy; *The Journal of Physical. Chemistry. C* 2018 122(21) 11455-11463.

**The project was supported by the Lendület program of the HALS/ELNR.**



# ELECTROCHEMICAL PERFORMANCES OF ANATASE TiO<sub>2</sub> NANOTUBE ARRAYS ELECTRODE IN IONIC LIQUID ELECTROLYTE THROUGH FUNCTIONALIZATION OF ADDITIVE FOR ELECTRODE PROTECTION

**Aleksandra Roganović<sup>a</sup>, Snežana Papović<sup>a</sup>, Nikola Cvjetičanin<sup>b</sup>, Milan Vraneš<sup>a</sup>, Slobodan Gadžurić<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Science, Department of Chemistry, Biochemistry and Environmental Protection, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad 21000, Serbia

<sup>b</sup> Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade 11158, Serbia

Ionic liquids (ILs), room temperature molten salts, can be considered as electrolytes for next generation of lithium-ion batteries (LIBs), because of their negligible flammability, thermal stability, good electrical conductivity and wide electrochemical stability window [1,2]. In this work the 0.5 M solution of LiTFSI salt in ionic liquid 1,3-diethylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide, (C<sub>2</sub>C<sub>2</sub>imTFSI), was tested as electrolyte for LIBs by using robust anatase TiO<sub>2</sub> nanotube arrays (NTAs) electrode and in parallel the same electrolyte with functionalized additive 1-methyl-3-sulfonatebutylimidazole. That additive is sulfonate-containing zwitterion, which prevents decomposition of electrolyte. Through that, the additive addition is contributing to that the voltage decreases less with the number of cycles. The galvanostatic (GS) testing was performed at room temperature, at current rate 3C. Capacity of TiO<sub>2</sub> NTAs is due to both bulk and surface storage of Li<sup>+</sup> ion, and significantly increases with addition of sulfonate-containing zwitterion (additive). GS experiments demonstrated excellent capacity retention with improved Coulombic efficiency during final cycling at current rate ~3C. The formation of film on electrode surface and its increase after GS cycling at elevated temperatures was confirmed by electrochemical impedance spectroscopy.

[1] M. Vraneš, N. Cvjetičanin, S. Papović, B. Šarac, I. Prisljan, P. Megušar, M. Bešter-Rogač, S. Gadžurić, *Journal of Molecular Liquids*, **2017** (243) 52–60.

[2] S. Papović, N. Cvjetičanin, S. Gadžurić, M. Bešter-Rogač, M. Vraneš, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2017** (19) 28139–28152.

**The authors acknowledge financial support of the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia (Grant No. 451-03-9/2021-14/200125)**

## SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NUCLEAR FACTOR I, A POTENTIAL METAL ION BINDING PROTEIN

Zeyad H. A. Nafae<sup>a,b</sup>, Kyosuke Nagata<sup>c</sup>, Béla Gyurcsik<sup>a</sup>

<sup>a</sup>University of Szeged, Dóm tér 7, 6720 Szeged Hungary, <sup>b</sup>University of Babylon, Hillah 51002 Babel, Iraq,  
<sup>c</sup>University of Tsukuba, Japan

The nuclear factor I (NFI) family of site-specific DNA binding proteins plays a role in both transcription and adenovirus (Ad) DNA replication. The studied NFI [1] consists of N-terminal DNA binding domain (NFI-BD), and a transcription activation part at the C-terminus. NFI-BD can be a metallonuclease candidate for gene therapy. Based on this purpose, this work covers the study on the purification, DNA and metal ion binding to get more information about its and properties.

The purification of this protein is a challenging task. High quantity of solubilized fraction, elution from the resin, sensitivity to room temperature, and tag cleavage are the most difficult steps in the NFI-BD expression and purification processes. In our strategy the expression conditions of GST-tagged NFI-BD (1-240 amino acids) is optimized using Rosetta E.coli strain, low concentration of inducer and long incubation time at low temperature in comparison with strain BL21 (DE) that produced high overexpressed insoluble target protein. To purify this fusion protein we explore the strong binding to the glutathione resin, which is reflected by the high concentration of glutathione solution needed to elute the target protein.

By gel electrophoresis mobility assay we showed that the GST-tagged NFI-BD specifically binds to its recognition site (located at the 5' end of the Ad5 genome). The solution structure of NFI-BD was studied by circular dichroism spectroscopy showing a good agreement with the predicted secondary structure. The effect of metal ion coordination is of peculiar interest, since the protein has several heavy metal binding cysteine and histidine amino acids. We studied the effect of metal ions on the secondary structure and DNA binding. The results suggest that metal ions may play role in both DNA binding and potential cleavage of specific DNA sequence.

[1] K. Nagata, R.A. Guggenheimer, J. Hurwitz; *PNAS (USA)*, **1983** (80) 6177-6181.

**Financial support from the Hungarian National Research, Development and Innovation Office (GINOP-2.3.2-15-2016-00038 and K\_16/120130) is gratefully acknowledged.**

# **KÖRNYEZETI KÉMIA SZEKCIÓ**

# NAGY METÁN HOZAMÚ TERVEZETT NANOKATALIZÁTOROK NAGYNYOMÁSÚ CO<sub>2</sub> ÁTALAKÍTÁSI REAKCIÓBAN

**Bali Henrik<sup>a</sup>, Ali Shan Malik<sup>a</sup>, Sági András<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup>Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar,  
Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

Az ipari forradalom beköszöntésével világszerte nagy mértékben megnőtt az energiatermelés, így rohamosan növekszik az atmoszféra CO<sub>2</sub> koncentrációja. Az antropogén CO<sub>2</sub>-kibocsátással foglalkozni kell. A légköri szén-dioxid koncentráció további növekedésének megakadályozása érdekében csökkenthető a kibocsátása vagy értékes anyagokká alakítható. A szén-dioxid hasznos termékekké (alkoholok, szénhidrogének stb..) való átalakításának egyik ígéretes és elterjedt módszere a folyamatos áramlású heterogén katalízissel végzett hidrogénezés. Szinte nincs is olyan ipari folyamat, amiben ne kapna jelentős szerepet a katalízis. Ezért a katalizátorok folyamatos fejlesztése egy elengedhetetlen lépés a technológiák fejlődésének érdekében. A nanorészecskék, nanoklaszterek gyakran előre nem megjósolható tulajdonságokkal rendelkeznek, szerepük a katalízisben jelentős. Munkám során sikeresen előállítottunk Pt, Rh, Rh szub-nanométeres (<2nm) részecskéket, illetve ezeket mezopórusos CeO<sub>2</sub>-ra és nagy fajlagos felületű szilika hordozóra (MCF-17) vittük fel 1%-ban. Az előállított katalizátorokat különböző szerkezetvizsgálati módszerekkel vizsgáltuk (BET, XRD, XPS, HRTEM), majd katalitikus aktivitását nagy nyomású CO<sub>2</sub> hidrogénezési reakcióban teszteltük, alacsonyabb hőmérséklet tartományban (220-340 °C).

## FOTOKATALIZÁTOR ELŐÁLLÍTÁSA ATOMI RÉTEGLEVÁLASZTÁSOS MÓDSZERREL

**Ballai Gergő<sup>a</sup>, Kedves Zsolt<sup>a</sup>, Pap Zsolt<sup>a</sup>, Sági András<sup>a</sup>, Sebastijan Kovačič<sup>b</sup>, Kukovecz Ákos<sup>a</sup>, Kónya Zoltán<sup>a,c</sup>**

<sup>a</sup> *Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

<sup>b</sup> *National Institute of Chemistry, Department of Polymer Chemistry and Technology, Hajdrihova 19, 1000 Ljubljana, Slovenia*

<sup>c</sup> *MTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

A félvezetők (például szervesetlen átmenetifém oxidok) alkalmazása szennyvizek fotokatalitikus tisztításában nagy érdeklődésre tart számot, néhány megoldatlan hiányosságuk ellenére is. Ezzel szemben a nagy fajlagos felületű és átjárhatóságú szerves félvezető polimerek, mint például a 2-hidroxiethyl-metakrilát alapú, PolyHIPE (High Internal Phase Emulsion) szerkezetek, ígéretes fotokatalizátorok lehetnek különböző szerves szennyezők lebontására szennyvíztisztítási eljárásokban. Ezen túl, e polimerek kiváló hordozók lehetnek szerves/szervesetlen kompozit fotokatalizátorok előállításához, nagy fajlagos felületük, kémiai inertségük, jó mechanikai stabilitásuk és adszorpciós tulajdonságai miatt.

Az atomi rétegleválasztás (ALD) egy modern vékonyréteg/nanorészecske előállítási eljárás, amely gőzfázisú prekursorok felületen lejátszódó reakcióján alapul. Ezzel a módszerrel akár nagy felületű anyagok is egyenletesen bevonhatók és az előállított réteg vastagsága, illetve a nanorészecskék mérete finomhangolható az ALD ciklusok számának változtatásával. A nagy felületű és átjárhatóságú szerves félvezető polimerek és az atomi rétegleválasztásos módszerrel előállított félvezető tulajdonságú átmenetifém-oxidok kombinálásával reményeink szerint javíthatók az egyes komponensek fotokatalitikus tulajdonságai.

A kutatásunk során célul tűztük ki, hogy nemzetközi együttműködés keretében atomi rétegleválasztásos módszerrel állítsunk elő polimer/ZnO és polimer/TiO<sub>2</sub> kompozit fotokatalizátorokat. Ehhez megállapítjuk a számunkra ideális kompozitok előállításához szükséges paramétereket (ALD ciklusok száma, ciklusidő). Az így előállított katalizátorokat, karakterizálást követően (pásztázó elektronmikroszkóp [SEM], energiadiszperzív röntgenspektroszkópia [EDS], termogravimetriás analízis [TGA] ) vizsgálatoknak vetettük alá. A jövőben különböző szerves szennyezők, mint például biszfenol A, fotooxidációs reakciójában fogjuk tesztelni.

# NAGYHATÉKONYSÁGÚ OXIDÁCIÓS ELJÁRÁSOK VIZSGÁLATA TRIMETOPRIM ÉS 5-FLUOROURACIL ELTÁVOLÍTÁSÁRA

Covic Anett<sup>a</sup>, Farkas Luca<sup>a</sup>, Alapi Tünde<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, H-6720 Szeged, Dóm tér 7, Hungary*

Vízisztítás szempontjából egyre több problémát okoznak napjainkban a biológiai hatással bíró viszont biológiailag nehezen lebomló vegyületek. Ezek közül kiemelt jelentőséggel bírnak a gyógyszer hatóanyagok, melyek környezetbe kerülése számos ökológiai és népegészségügyi problémát okoz. Ennek következtében a biológiai vízkezelés mellett kiegészítő vízkezelésként célszerű különböző kiegészítő eljárásokat alkalmazni, melyek közül a gyökgeneráláson alapuló eljárások csoportját nevezzük nagyhatékonyságú oxidációs eljárásoknak. Munkánk során két vegyület, az antibiotikumokkal együtt használt, azok hatását fokozó trimetoprim (TRIM) és a daganatos terápiákban régóta gyakran és nagy mennyiségben alkalmazott 5-fluorouracil (5-FU) átalakulását vizsgáltuk különböző nagyhatékonyságú oxidációs eljárásokkal, melyek az UV (254 nm), UV/VUV (254 és 185 nm együttes alkalmazása) ózonos kezelés és O<sub>3</sub>/UV (254 nm) kombináció voltak.

A TRIM és 5-FU 254 nm-re vonatkozó moláris abszorbanciái közt nincs jelentős eltérés (TRIM:  $\epsilon_{285\text{nm}} = 4477,5 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , 5-FU:  $\epsilon_{265\text{nm}} = 5296,6 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ), ennek ellenére a TRIM UV fotolízis során rendkívül lassan, míg az 5-FU igen gyorsan alakul át. A kis intenzitású 185 nm-es fotonok jelenléte közel hússzorosára növelte az átalakulás sebességét TRIM esetén és duplájára 5-FU esetén, ami a víz VUV fotolízise során képződő gyökök hozzájárulásával értelmezhető. A kis intenzitású VUV fotonok jelentősége különösen nagy az UV fotolízis során felhalmozódó köztitermékek elbontása és a mineralizáció szempontjából. Az ózonos kezelés mindkét hatóanyag esetén rendkívül hatékony volt azok átalakulása szempontjából, azonban hatékony mineralizációt csak UV fényel való kombináció során értünk el. A továbbiakban az egyes módszereket összehasonlítottuk azok fajlagos energiafelhasználása, a kezelt oldatok toxicitásának változása és a mátrix hatás szempontjából is, amikor biológiailag kezelt szennyvizet használtunk mátrixként.

**A munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium UNKP-21-5-SZTE-594 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült. Alapi Tünde Köszöni a Bolyai János Kutatói Ösztöndíj és az NKFIH FK132742 számú OTKA pályázat támogatását.**

# KÍSÉRLETI PARAMÉTEREK HATÁSA A SZÉN-DIOXID ELEKTROLIZÁLÓ CELLÁK HOSSZÚTÁVÚ MŰKÖDÉSÉRE

**Samu Angelika Angelika<sup>a</sup>, Kecsenovity Egon<sup>a</sup>, Endródi Balázs<sup>a</sup>, Janáky Csaba<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

<sup>b</sup>ThalesNano Energy Zrt., 1031 Budapest, Záhony utca 7.

Korunk aktuális, kihívást jelentő feladata az üvegházhatású gázok (pl. CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O) koncentrációjának csökkentése Földünk légkörében. Erre olyan technológiák szolgálhatnak legjobb megoldásként, amely révén nagy hatékonysággal alakítható át a CO<sub>2</sub> az ipar számára hasznos alapanyagokká. A CO<sub>2</sub> elektrokémiai redukciója egy ígéretes módszer a pontforrások (pl. cementgyár, erőmű) kibocsátásának csökkentésére. A szükséges energiát megújuló energiaforrásokból (pl. Nap, szél) biztosíthatjuk, ami időszakosan a társadalmi igényekhez képest feleslegben áll rendelkezésre. Ezáltal egy fenntartható és környezettudatos technológia alakítható ki.

Jelenleg olyan elektrolizáló cellák fejlesztésével foglalkozunk, amelyek segítségével a CO<sub>2</sub> gázfázisú elektrokémiai redukciója valósítható meg. Célunk a kísérleti körülmények optimalizálása a hosszútávú (>100 óra) stabil működés érdekében [1]. Ennek elérésének érdekében vizsgáljuk a gáz áramlási sebességének, a cellahőmérsékletnek, a cellába áramló elektrolit oldat összetételének, illetve a cellában alkalmazott anioncserélő membrán vastagságának a hatását [2].

A kísérleteinknél egy kételektrodos, összepréselt cellát alkalmazunk, ahol nincs az elektród-membrán-elektrod rétegek között folyadékréteg. A cellában kereskedelmi forgalomban elérhető katalizátorokat, szénpapírokat és membránokat használunk. A cellák elektrokémiai viselkedésének felderítését elektrokémiai módszerek segítségével (lineáris voltammetria, kronoamperometria, impedancia spektroszkópia) végezzük. A hosszútávú, állandó feszültségen vagy áramerősségen történő elektrolízisek során keletkező termékeket (CO, H<sub>2</sub>) gázkromatográfia segítségével analizáljuk.

[1] B. Endródi, A. Samu, E. Kecsenovity, T. Halmágyi, D. Sebők, C. Janáky, *Nature Energy*, **2021** (6) 439-448

[2] B. Endródi, E. Kecsenovity, A. Samu, T. Halmágyi, S. Rojas-Carbonell, L. Wang, Y. Yan, C. Janáky, *Energy and Environmental Science*, **2020** (13) 4098-4105

**AZ INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI MINISZTERIUM UNKP-21-3-SZTE-407 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL FINANSZÍROZOTT SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.**

# NI-LEL ADALEKOLT, KÜLÖNBÖZŐ SZERKEZETŰ Ce-OXID KATALIZÁTOROK MŰKÖDÉSÉNEK VIZSGÁLATA CO<sub>2</sub> REDUKCIÓS REAKCIÓBAN

**Szamosvölgyi Ákos<sup>a</sup>, Thangavel Rajukmar<sup>a</sup>, Sági András<sup>a,b</sup>, Szent Imre<sup>a</sup>, Ábel Marietta<sup>a</sup>,  
Juan Fernando Gómez Pérez<sup>a</sup>, Baán Kornélia<sup>a</sup>, Fogarassy Zsolt<sup>c</sup>, Dodony Erzsébet<sup>c</sup>,  
Kiss János<sup>a,d</sup>, Kukovecz Ákos<sup>a</sup>, Kónya Zoltán<sup>a,d</sup>**

<sup>a</sup>Szegedi Tudományegyetem Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

<sup>b</sup>Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet, 6720, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

<sup>c</sup>MTA Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet,  
1121, Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29.

<sup>d</sup>Szegedi Tudományegyetem MTA-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport,  
6720, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Ni-lel feljavított CeO<sub>2</sub> alapú katalizátorokat vizsgáltunk, hogy Két anyagot állítottunk elő és vizsgáltunk. Szolvotermális módszerrel előállított CeO<sub>2</sub> katalizátor hordozókra impregnáltunk NiO nanorészecskéket (10mol% NiO/CeO<sub>2</sub>), illetve szolvotermális módszerrel állítottunk elő olyan Ce-oxidot, amelynek a kristályrácsába Ni ionok épülnek be a Ce ionokat helyettesítve (Ce<sub>0.9</sub>Ni<sub>0.1</sub>O<sub>2</sub>). Mindkét anyagban, a fém atomok névleges atomi eloszlása Ce:Ni 9:1. A ~10nm-es szemcsékből álló mintákat az anyagtudományokban elterjedt vizsgálati módszerekkel (TEM, XRD, BET, H<sub>2</sub>-TPR, Raman-spektroszkópia) karakterizáltuk. A CO<sub>2</sub> redukcióban katalitikus aktivitásukat folyamatos áramú, gázfázisú reaktorban teszteltük. A reakció lezajlását egy FID és TCD detektorral felszerelt gázkromatográf segítségével követtük. A kevert oxid rendszer konverziója 79% volt, magas (97%-os) metán szelektivitással. Ezzel ellentétben a szilárd oldat rendszer szinte kizárólag CO-t termel. A reakció során keletkező termékek kialakulását és a köztitermékek szerepét *in situ* DRIFTS módszerrel vizsgáltuk. *Ex situ* XPS mérésekkel követtük a Ce<sup>3+</sup> és Ce<sup>4+</sup> arányának változását a reakció során, így jellemezve az anyagok redoxi kapacitását. Emellett HRTEM és HAADF felvételek készültek az előkezelés és a reakció utáni állapotokról. EDS segítségével vizualizáltuk a Ni eloszlását a mintákban. A kevert oxid mintában a Ni és pár nanométeres zárványok formájában van jelen. Ezzel ellentétben, ha a Ni atomok beépülnek a CeO<sub>2</sub> kristályrácsba, eloszlásuk homogén – ebben az esetben a Ni redukálhatósága a folyamat során korlátozott. Ezzel magyarázható ennek a katalizátornak az alacsonyabb aktivitása és CO képződés felé irányuló szelektivitása.

**Ez a projekt Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-5-SZTE-663 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti, Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával jött létre.**



## **SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ III.**

# KARBOPIRONIN ALAPVÁZZAL RENDELKEZŐ FLUORESZCENS FESTÉKEK ELŐÁLLÍTÁSA

Ágoston Henrietta<sup>a</sup>, Mernyák Erzsébet<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék, Dóm tér 8, 6720 Szeged*

A modern biológiai és orvosi diagnosztikai eljárásokban a fluoreszcens technikák egyre inkább felváltják a hagyományos, radioaktív nyomjelzésen alapuló módszereket. Az utóbbi néhány évben ugrásszerűen megnövekedett az igény új generációs, széleskörűen alkalmazható fluorofórokra, és jelölési technikák kidolgozására. Kutatómunkánkkal mi is ezt a területet kívánjuk erősíteni. Az érdeklődés főként a vörös tartományban abszorbeáló és emittáló fluorofórok felé irányul, amelyek jeles képviselőiként tartják számon a karbopironin vázas fluoreszcens festékeket [1]. Jelen előadás témája olyan karbopironin vázas fluofórok szintézise, amelyek széleskörűen alkalmazhatók különféle biomolekulák jelölésére. A festékek előállítását két építőelem összekapcsolásával hajtottuk végre. Az egyik alegységen, Suzuki-kapcsolással kialakítottunk egy izopropenil-csoportot, amely később, a Friedel-Crafts reakcióban alkilező szerként szerepelt. Ahhoz, hogy az alegységek ciklokondenzációval összekapcsolhatók legyenek, a másik építőelemen egy primer alkoholos hidroxilcsoportot képeztünk. A festékmolekula gyűrűrendszerének létrehozását követően, oxidációs reakciót hajtottunk végre, amelynek eredményeként konjugált kettős kötésű rendszert tartalmazó alapvázhhoz jutottunk [2]. Egyik építőelemre olyan funkciós csoportot is építettünk, amely lehetővé teszi a festék biomolekulákhoz való konjugálását, többféle, kémiai és metabolitikusan stabil kapcsolóelem kialakításán keresztül.

[1] L. Möckl, W. E. Moerner, *Journal of American Chemical Society*, **2020** (42), 17828-17844.

[2] L. Wei, Z. Chen, L. Shi, et al., *Nature*, **2017** (7651), 465-470.

# DIKETONÁTO-SZILOL KOMPLEXEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS ANALITIKAI VIZSGÁLATA

**Szathmári Balázs<sup>a</sup>, Kelemen Zsolt<sup>a</sup>, Holczbauer Tamás<sup>b</sup>, Kovács Ilona<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék,  
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4. Ch. épület*

<sup>b</sup>*Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémia Intézet és Kémiai Krisztallográfiai Laboratórium,  
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2. épület*

A szilícium hajlamos négyesnél magasabb, ötös [1], hatos [1], illetve akár hetes [2] koordinációjú vegyületek kialakítására, amelyek érdekes szerkezeti tulajdonságokat mutatnak. A szilícium koordinációs kémiában elterjedten használt ligandumok a kétfogú 1,3-diketonok, vagy másnéven  $\beta$ -diketonáto ligandumok. Az irodalomban megtalálhatóak egy, kettő, illetve három  $\beta$ -diketonáto ligandumot tartalmazó szilíciumkomplexek is [3]. Korábban a BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszéken már számos, a gyűrűben szubsztituált szilaciklapentadiént (szilolt) állítottak elő, és vizsgálták ezen vegyületek tulajdonságait. Munkám során a szilícium koordinációs lehetőségeit vizsgáltam szilolok  $\beta$  diketonáto ligandumokkal alkotott vegyületeiben. Ehhez monoklór-, illetve diklór-szilol és acetyl-aceton, illetve dibenzoil-metán reakciójával új, korábban még nem ismert vegyületeket állítottam elő. Az előállított vegyületek szerkezetét  $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ -,  $^{29}\text{Si}$ -, különböző korrelációs és alacsony hőmérsékletű NMR spektroszkópiai mérésekkel, IR spektroszkópiával és egykristály röntgendiffrakciós mérésekkel karakterizáltuk.

A gyakorlati munkát kvantumkémiai számításokkal egészítettük ki, amelyek segítségével feltérképeztük a reakciók lehetséges mechanizmusát, illetve megvizsgáltuk, hogy a szilolgyűrű, illetve diketonáto ligandum különböző szubsztituensei milyen hatással vannak a komplexképzési reakciókra.

A halogénezett szilolok hidrolízisre hajlamosak, ezért minden reakció esetén standard Schlenk-technikát alkalmaztam, szárított nitrogén, illetve argon atmoszférában dolgoztam.

[1] Könyv szerkesztője: F. L. Boschke, A fejezet szerzői: S. N. Tandura, M. G. Voronkov, N. V. Alekseev; *Topics in Current Chemistry - Structural Chemistry of Boron and Silicon; Molecular and Electronic Structure of Penta- and Hexacoordinate Silicon Compounds*, **1986** 99–189.

[2] H. Kameo, T. Kawamoto, S. Sakaki, D. Bourissou, H. Nakazawa, *Organometallics*, **2014**, (33) 6557–6567.

[3] G. González-García, E. Álvarez, J. A. Gutiérrez, *Polyhedron*, **2012** (41) 127–133.

## CHAN-LAM KAPCSOLÁSOK 13 $\alpha$ -ÖSZTRON SORBAN

**Traj Péter<sup>a</sup>, Abdolkhalig Hazhmat Ali<sup>b</sup>, Kovács Édua<sup>a</sup>, Zupkó István<sup>b</sup>, Mernyák Erzsébet<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar Szerves Kémiai Tanszék,  
H-6720 Szeged, Dóm tér 8.

<sup>b</sup>Szegedi Tudományegyetem Gyógyszerésztudományi Kar Gyógyszerhatástani és Biofarmáciai Intézet,  
H-6720 Szeged, Eötvös utca 6.

Napjainkban a szerves- és gyógyszerkémia kiemelt kutatási területe a szelektív hatású tumorellenes szerek kifejlesztése. Kutatócsoportunkban a természetes ösztрон 13-epimerén, a 13 $\alpha$ -ösztрон fenolos A-gyűrűjén olyan módosításokat végeztek, amelyek során hormonálisan inaktív, potenciálisan rákellenes szereket állítottak elő.

Munkánk célja a 13 $\alpha$ -ösztрон A-gyűrűjén, a 3-as hidroxilcsoporton történő Chan-Lam kapcsolás volt [1], amely során a kiindulási szteroidot aril-boronsavakkal reagáltatva diaril-éterek nyerhetők.

Elsőként az irodalomban ismert reakciókörülményeket próbáltuk szteroidok átalakításaira alkalmazni [2,3]. A hozamok javítása érdekében optimalizációs reakciókat végeztünk. Réz(I) –és réz(II)-alapú katalizátorokat is alkalmaztunk, vizsgáltuk a reakciók oldószerfüggését, valamint szerves és szervetlen bázisokkal is kiprobáltuk a kapcsolásokat.

Az optimális reakciókörülményt kiaknázva, 11 tagú, vegyes, esetenként heterociklusos éterekből álló vegyület könyvtárat hoztunk létre. Az újonnan előállított származékok antiproliferatív hatásának vizsgálatát humán adherens nőgyógyászati sejtvonalakon végeztük *in vitro*, MTT módszerrel. Eredményeink szerint a kinolin-3-boronsavból előállított származék kiemelkedő tumorellenes hatást mutat méhnyak- és petefészek tumorsejtvonalon, így indokoltnak látjuk a további, hatásmechanizmusra vonatkozó vizsgálatokat.

[1] J.-Q. Chen, J.-H. Li, Z.-B. Dong; *Advanced Synthesis & Catalysis*, **2020** (362) 3311–3331.

[2] M. A. Kroc, A. Patil, A. Carlos, J. Ballantine, S. Aguilar, D. L. Mo, H. Y. Wang, D. S. Mueller, D. J. Wink, L. L. Anderson; *Tetrahedron*, **2017**, (73), 4125–4137.

[3] J. K. Čermák, V. Círka; *Tetrahedron Letters*, **2014** (55) 4185–4188.

**A munka a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal TKP2020-NKFIH-1279-2/2020 sz. és SNN 124329 sz. projektjének támogatásával valósult meg.**

# OPTIKAILAG AKTÍV H-FOSZFINÁTOK ELŐÁLLÍTÁSÁNAK ÉS FELHASZNÁLÁSÁNAK VIZSGÁLATA

**Varga Bence<sup>a</sup>, Buna Levente<sup>a</sup>, Pető Hajnalka<sup>a</sup>, Bagi Péter<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,  
1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.*

A *H*-foszfinátok és a szekunder foszfin-oxidok kiemelt jelentőséggel bírnak a foszforvegyületek körében, ugyanis stabil foszfor-sztereogén centrumot tartalmazó intermediereknek tekinthetők, amelyek sztereospecifikusan továbbalakíthatók *Pudovik*-, *Michaelis-Becker*, *Arthertod-Todd*- vagy *Hirao*-reakciókban [1]. Azonban az irodalomban eddig kevés sztereoselektív szintézist vagy rezolválást publikáltak P(O)H funkciós csoportot tartalmazó vegyületekre [1]. Ezen vegyületek másik jelentőségét az adja, hogy *P*-királis savakká alakíthatók, amelyek NMR-shift reagensként vagy organokatalizátorként is alkalmazhatók [2].

Korábbi munkánk folytatásaképp [3], célul tűztük ki, hogy az első preparatív rezolválási eljárást kidolgozzuk *P*-sztereogén centrumot tartalmazó *H*-foszfinátokra. Először egy modellvegyület [Ph(AdO)P(O)H] esetén optimaltunk a rezolválási körülményeket. Ezt követően az eljárást sikeresen terjesztettük ki a vegyületsalád több tagjára is, és vizsgáltuk, hogy az alkoxi vagy szubsztituált aril csoportok hogyan befolyásolják az enantiomerelválasztást. Így számos származék esetén kaptunk enantiomertiszta termékeket. A kialakult diasztereomerkomplexek szerkezetét egykristály röntgendiffrakciós mérésekkel vizsgáltuk, és azonosítottuk az enantiomerfelismerésért felelős kölcsönhatásokat. Vizsgáltuk a komplex elbontási lehetőségeit, majd az eljárás méretnövelhetőségét is. Ezt követően az optikailag aktív adamantil-fenil-*H*-foszfinátból előállítottunk szekunder és terciér foszfin-oxidokat, tiofoszfonátot és foszfonamidot sztereoselektív reakciókban. Végül az így előállított *P*-királis tiofoszfonátot sikeresen felhasználtuk, mint királis NMR szolvatálószer.

[1] S. Lemouzy, L. Giordano, D. Héroult, 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, P. Szemesi, P. Nagy, R. Herbay, T. Holczbauer, E. Fogassy, Gy. Keglevich, P. Bagi, *Journal of Organic Chemistry*, **2021** közlésre elfogadva.

**Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült (ÚNKP-21-3-II-BME-299).**

# KOVALENSEN RÖGZÍTHETŐ HETEROTRICIKLUSOS KORONAÉTEREK ELŐÁLLÍTÁSA OPTOKÉMIAI Pb<sup>2+</sup>- SZENZOR FEJLESZTÉSÉHEZ

**Vezse Panna<sup>a,b</sup>, Kovács Korinna<sup>a,c</sup>, Gede Martin<sup>a,d</sup>, Ster Dániel<sup>a</sup>, Golcs Ádám<sup>a</sup>, Huszthy Péter<sup>a</sup>,  
Tóth Tünde<sup>a,e</sup>**

<sup>a</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,  
Budapest, 1111 Szent Gellért tér 4.*

<sup>b</sup>*HandInScan Zrt., Budapest, 1111 Fehérvári út 44.*

<sup>c</sup>*ChinoIn Zrt., Technikai Fejlesztési Osztály, Budapest, 1045 Tó utca 1-5.*

<sup>d</sup>*King Abdullah University of Science and Technology, Advanced Membranes and Porous Materials Center,  
Division of Physical Science and Engineering, Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia*

<sup>e</sup>*Energiatudományi Kutatóközpont, Sugárkémiai Laboratórium, Budapest, 1121 Konkoly-Thege Miklós út 29-33.*

Munkánk során célul tűztük ki a korábban Pb<sup>2+</sup>-szelektivitást mutató akridon-18-korona-6-éterek [1-3] kovalensen immobilizálható analogonjainak előállítását a szelektivitási sajátságok megtartása mellett. Ennek során előállítottunk különböző, a heteroaromás egységen vagy az oligoéteres gyűrűn módosított, könnyedén funkcionálizálható csoportokat tartalmazó makrociklusokat, majd vizsgáltuk az adott szerkezeti módosítások hatását a gazdamolekulák fémionfelismerő-képességére. Az előállított makrociklust a jövőben 96-lyukú polisztirol mikrotálca-rendszerhez kívánjuk rögzíteni. Az így kapott eszköz fluoreszcens „plate-reader”-rel alkalmazva várhatóan képes lesz Pb<sup>2+</sup>-tartalmú szennyvízminták nagy áteresztőképességű analizálására [4].

[1] L. Szalay, V. Farkas, E. Vass, M. Hollósi, I. Móczár, Á. Pintér, P. Huszthy; *Tetrahedron: Asymmetry*, **2004** (15) 1487-1493.

[2] T. Németh, A. Kormos, T. Tóth, G. T. Balogh, P. Huszthy; *Monatshefte für Chemie-Chemical Monthly*, **2015** (146) 1291-1297.

[3] Á. Golcs, V. Horváth, P. Huszthy, T. Tóth; *Sensors*, **2018** (18) 1407-1420.

[4] Á. Golcs, G. Dargó, G. T. Balogh, P. Huszthy, T. Tóth; *Analytica Chimica Acta*, **2021** (1167) 338586-338596.

Szeretném köszönetemet kifejezni Kalóczkai János Attila és Erdélyi Ádám MSc-hallgatóknak, akik jelenleg is a projekten dolgoznak. Köszönet Molnárné Bernáth Ritának és Kiss Erzsébetnek a vegyületek karakterizálásában nyújtott segítségükért. A kutatást az Országos Tudományos Kutatási Alap K128473 számú pályázata finanszírozta.

# SZUBSZTITUENS-HATÁSOK FOSZFA-MICHAEL-ADDÍCIÓBAN: SZÁMÍTÁSOS KÉMIAI VIZSGÁLATOK

**Fekete Csilla<sup>a</sup>, Benkő Zoltán<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.*

A katalitikus foszfa-Michael-addíció az acilfoszfinok előállításának egyik lehetősége, melynek termékét oxidálva mono- vagy bisz-acilfoszfin-oxidot (MAPO, BAPO) nyerhetünk [2]. Ezek a vegyületek hatékonyan alkalmazhatók fotoiniciátorokként, hiszen a foszfor-tartalmú iniciátorok nagy előnye, hogy belőlük ultraibolya-fény hatására foszfonil-gyök (R<sub>2</sub>PO) keletkezik, amely igen reaktív, ezáltal elindítja a gyökös polimerizációt.

Hansjörg Grützmacher és csoportja (ETH Zürich) egy ilyen típusú reakció során bisz-[2,4,6-trimetilbenzoi]-foszfint és metil-akrilátot reagáltattak tetrametil-guanidin jelenlétében, melynek terméke egy bisz-acilfoszfin. Munkám során ennek a reakciónak a mechanizmusát vizsgáltam sűrűségfüggvény-elméleten alapuló számítási kémiai módszerekkel. A számítások alapján a reakció lejátszódik szobahőmérsékleten, amely összhangban van a kísérletekkel.

A reakció tanulmányozása során további lehetőségek merültek fel, hiszen a foszfin módosításával olyan vegyületeket állíthatunk elő, melyeket akár aktív fotoiniciátorokat eredményezhetnek. Az eredeti vegyületből kiindulva különböző szubsztituensekkel történő variálás során mono-acilfoszfinokat vizsgáltam, hogy miként befolyásolják a szubsztituensek a mechanizmus egyes lépéseinek aktiválási energiáit és reakcióhőit, különböző deskriptorok alkalmazásával (Parr-függvények, stabilizáló pályakölcsönhatások, Hammett-konstansok stb.).

[1] D. Enders, A. Saint-Dizier, M. I. Lannou, A. Lenzen, *European Journal of Organic Chemistry*, **2006** (1) 29–49.

[2] G. Müller, M. Zalibera, G. Gescheidt, A. Rosenthal, G. Santiso-Quinones, K. Dietliker, H. Grützmacher, *Macromolecular Rapid Communications*. **2015** (36) 553–557.

**Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-1-I-BME-171 és ÚNKP-21-5-BME-384 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphól finanszírozott szakmai támogatásával készült.**

# ANYAGTUDOMÁNYI SZEKCIÓ



## PEROVSKIT SZERKEZETŰ $\text{BaTiO}_3$ ÉS $\text{ZnTiO}_3$ MECHANOKÉMIAI ELŐÁLLÍTÁSA

Kozma Gábor <sup>a</sup>, Berkési Dániel <sup>a</sup>, Lipták Kata <sup>a</sup>, Kónya Zoltán <sup>a,b</sup>, Kukovecz Ákos <sup>a</sup>

<sup>a</sup> SZTE, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

<sup>b</sup> MTA, Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, 6720, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

A perovszkit-szerkezetű anyagok családjába számos különböző összetételű vegyület tartozik, melyek szubsztitúcióval és adalékolással még változatosabbá tehetők. Ezek tulajdonságai rendkívül széleskörű alkalmazást tesznek lehetővé, leginkább az elektronikai iparban, üzemanyagcella fejlesztéseknél és katalitikus folyamatoknál. Az összes általános kerámia-előállítási módszer alkalmas perovszkitek szintézisére is. Az eljárás módja nagyon fontos szerepet játszik a termék kémiai és fizikai tulajdonságainak kialakításában. A nagy energiájú őrlések hatására az anyag folytonos keverése biztosított, illetve az aprózódás miatt új kontaktfelületek jönnek létre. Ennek köszönhetően lecsökken a diffúzióút, így a rendszer nem igényel külső fűtést. A folyamat során vagy nagy diszperzitású anyagok képződnek, tipikusan fémporok, vagy oxid alapú anyagok (mechanikai aktiváció), vagy szilárd fázisú reakcióban új termékek alakulnak ki (mechanokémiai szintézis). A módszer egyik jellemzője, hogy a termék nagy hibasűrűségű lesz.

Munkánk során célul tűztük ki a mechanokémiai perovszkit szintézis megvalósítását, valamint az őrlés során használt energiák számszerűsítését, és a két folyamat közti összefüggések feltárását. Ehhez egy bolygó golyósmalmot és a  $\text{BaO}$   $\text{TiO}_2$ -dal való reakcióját használtuk fel. A kísérletek során a  $\text{BaO}$  és a  $\text{TiO}_2$  bemért mennyiségeit nem változtattuk. Az energiaértékek számításához három fontos paramétert vettünk figyelembe: az őrlődények és őrlőgolyók anyagi minőségét, az őrlés sebességét, vagyis az őrlőtégely fordulatszámát, illetve az alkalmazott golyók számát. Ezeknek a tényezőknek a szisztematikus változtatásával egy paraméter teret alakítottunk ki, és a kísérleteinket ezen belül végeztük el. Az átalakulást röntgendiffrakciós (XRD) méréssel követtük nyomon, valamint az alkalmazott energiákat a Burgio-Rojac energiamodellel határoztuk meg. Célunk volt, hogy ebből a két megközelítésből olyan következtetéseket tudjunk levonni, amelyek a későbbiekben más perovszkit szerkezetű anyagok előállításánál fel tudják gyorsítani az optimális őrlési paraméterek megválasztását. Ezért a  $\text{BaTiO}_3$ -ra vonatkozó vizsgálatok után a cink-titanát ( $\text{ZnTiO}_3$ ) előállításával ellenőriztük eredményeinket.

**Az előadás a Magyar Tudományos Akadémia, BO/00835/19/7 (Kozma Gábor) számú Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával, valamint az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-5-SZTE-547 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának szakmai támogatásával készült.**

# BIODEGRADÁBILIS KERESZTKÖTÖTT POLIMEREK VISELKEDÉSE VIZES KÖZEGBEN

**Papp Vanda<sup>a</sup>, Vadkerti Bence<sup>a</sup>, Kéri Mónika<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Debreceni Egyetem, 4032. Debrecen, Egyetem tér 1.*

Napjainkban a növekvő orvosi, gyógyszerészeti, valamint környezetvédelmi igények következtében a polimer- kutatások központjába olyan új polimerek előállítása került, melyek biológiailag kompatibilisek és lebomlóak. [1] A poliuretán alapú polimerek is ide tartoznak, melyek egyúttal kiváló fizikai, mechanikai tulajdonságokkal is rendelkeznek. Általában három fő alkotóból épülnek fel: diizocianátok, diolok és keresztkötő ágensek. Ez utóbbi az alap polimer láncok közötti keresztkötések számát növelik, melynek értékétől jelentősen függnék a polimer makroszkopikus tulajdonságai. [1] A keresztkötés sűrűség meghatározásának számos módszere ismert, melyek egyik jó alternatívája a folyadék fázisú NMR. Ily módon mérhető a polimert duzzasztó folyadék relaxációs ( $T_2$ ) ideje, mely összefüggésben áll a keresztkötések számával. [2]

Munkám során olyan poliuretán alapú keresztkötött polimereket vizsgáltam speciális NMR technikákkal, melyeket poli( $\epsilon$ -kaprolakton)diol és 1,6-hexametiléndiizocianát poliaddíciós reakciójával állítottak elő különböző mennyiségű keresztkötő ágens (szacharóz) jelenlétében. [1] A vízben duzzasztott polimereket egyrészt NMR relaxometriával vizsgáltuk és három különböző mobilitású relaxációs domént különítettünk el. Mobilitásuk, valamint a duzzadás során bekövetkező változásuk alapján a doméneket a polimerváz különböző részeihez, és a vázat kitöltő folyadékhoz rendeltük (keresztkötött lánc, mobilis lánc, kitöltő folyadék). Az egyes minták esetén a kötöttebb/ mobilisabb lánchoz rendelhető domének összevetéséből, valamint a duzzadás során mért relaxációs idők összehasonlításából következtetéseket vontunk le a keresztkötöttség mértékéről. Ily módon a kisterű relaxometriás mérések jó egyezést adtak a hagyományos duzzasztási kísérlet eredményeivel. A pórusszerkezetben található térrészek méretét NMR krioporozimetriával vizsgáltuk vizes közegben és egyes minták esetén sikeresen meghatároztuk a rés geometriájú térrészek méretét. Összegezve, munkám során elsősorban kisterű, roncsolás mentes, akár terepen is alkalmazható NMR spektroszkópiás módszereket optimalizáltam keresztkötésszám meghatározására biológiailag lebontható polimerekben.

[1] L. Nagy et al., *Polymers*, **2019**, 11(5), 825.

[2] F. Cavalli et al., *Macromol. Chem. Phys.* **2020**, 221, 1900387

**AZ INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI MINISZTERIUM ÚNKP-21-3 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL FINANSZÍROZOTT SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.**

# POLIMER AEROGÉLEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS GÁZSZEPARÁCIÓS ALKALMAZÁSUK

**Pércsi Dániel<sup>a</sup>, Moldován Krisztián<sup>a</sup>, Kalmár József<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.*

Mai ismereteink szerint a Föld legkisebb sűrűségű szilárd anyagai az aerogélek, melyek nyitott pórusos szerkezetűek, és nagy fajlagos felületüknek köszönhetően számos területen alkalmazzák őket. Felhasználásuk szempontjából problémát jelent ridegségük és törékenységük. Erre jelentenek megoldást a polimer alapú aerogélek, melyek magukban hordozzák az aerogélek általános kedvező tulajdonságait, emellett megfelelő mechanikai tulajdonságokkal is rendelkeznek.

Munkánk során olyan szintetikus polimer (poliamid és poliimid) aerogélek előállítására törekedtünk, melyek szerkezetileg kellően stabilisak és kedvező mechanikai tulajdonságokkal rendelkeznek. [1-2] A polimer gélek szintézise után szuperkritikus szén-dioxiddal szárítottuk az alkogéleket. A szerkezetüket számos műszeres módszerrel elemeztük. Végeztünk nyomószilárdság mérést, pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) vizsgáltuk a morfológiájukat, infravörös spektroszkópiával (IR) kémiai szerkezetüket. Fajlagos felületének nagyságát és a pórusok átmérőjét  $N_2$  adszorpció-deszorpció porozimetriával mértük.

Az elkészült aerogélek felhasználását gázszeperációs kísérletek során vizsgáltuk. Ezek keretében azt mértük, hogy a polimer alapú aerogélek képesek-e fizikailag elválasztani kis molekulatömegű gázelegyek komponenseit egymástól. A mérések kivitelezéséhez egy vákuum-rendszerből és egy tömegspektrometriás detektorból álló berendezést alkalmaztunk, amellyel valós időben, kvantitatívan követni lehet az átengedett gázokat [3].

- [1] Meador, M. A. B., Alemán, C. R., Hanson, K., Ramirez, N., Vivod, S. L., Wilmoth, N., & McCorkle, L. *ACS applied materials & interfaces*, **2015** 7(2), 1240-1249.
- [2] Williams, J. C., Meador, M. A. B., McCorkle, L., Mueller, C., & Wilmoth, N. *Chemistry of Materials*, **2014** 26(14), 4163-4171.
- [3] Kovács, R. L., Langer, G., Gyöngyösi, S., & Erdélyi, Z. *Review of Scientific Instruments*, **2021** 92(1), 015120.

## DINAMIKUS SCHIFF-BÁZIS KÖTÉSEKEN ALAPULÓ, ÖNGYÓGYÍTÓ TULAJDONSÁGOKKAL RENDELKEZŐ POLIVINIL-ALKOHOL

**Takács Tamás<sup>a,b</sup>, Mohamed M. Abdelghafour<sup>a,c</sup>, Łukasz Grzegorz Lamch<sup>d</sup>, Szent Imre<sup>b</sup>, Sebők Dániel<sup>b</sup>, Janovák László<sup>a\*</sup>, Kukovecz Ákos<sup>b\*</sup>**

<sup>a</sup>Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

<sup>b</sup>Szeged, Hungary Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

<sup>c</sup>Department of Chemistry, Faculty of Science, Zagazig University, Zagazig 44519, Egypt

<sup>d</sup>Department of Engineering and Technology of Chemical Processes, Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology, 50-370 Wrocław, Poland

Az öngyógyító polimerek olyan különleges tulajdonságokkal rendelkező anyagok, amelyek az anyagtudományi kutatások egy jelentős hányadát adják. A biodegradábilis és biokompatibilis biopolimerek az elmúlt időszakban egyre inkább a figyelem középpontjába kerültek. Jelen előadás célja egy olyan új, polivinil-alkohol (PVA) alapú funkcionizált biopolimer előállításának és karakterizálásának bemutatása, mely esetében a makromolekulák egyszerre tartalmaznak formil- és aminocsoportokat, amelyek egymással reagálva (ún. Schiff-bázis reakció) a PVA-t autonóm öngyógyító képességgel ruházzák fel. A PVA-t különböző mértékben funkcionizáltuk (0,89 – 7,12%) 4-formil-benzoosavval (4-FBA) és 3,4-diamino-benzoosavval (3,4-DABA) Steglich-féle észterifikációs reakció során.

A polimer sikeres funkcionizálásának megerősítésére ATR-FTIR méréseket végeztünk, míg optikai mikroszkópiás, pásztázó elektronmikroszkópiás és röntgen mikrotomográfiás (micro-CT) vizsgálatokkal a polimerek öngyógyító képességét tanulmányoztuk külső ingerek és minden egyéb adalékanyag hiányában. A mechanikai és termoanalitikai vizsgálatok alapján az előállított polimer nemcsak a kiindulási PVA tulajdonságait mutatja (termoplaszticitás, biokompatibilitás, biodegradabilitás), hanem előnyös mechanikai tulajdonságokkal (rugalmasság, viszonylag nagy megnyújthatóság) is rendelkezik, amely tulajdonságok a funkcionizálási fok változtatásával hangolhatók.

Mivel számos természetes és szintetikus polimer tartalmaz szabad hidroxilcsoportokat az ismétlődő egységeiben, a fent említett eljárás egyszerű megoldást kínál a polimerek funkcionizálására, még alacsony hidroxilcsoport-tartalom esetén is. Mindemellett, az előadásban bemutatásra kerülő funkcionizált polimer egy olyan új öngyógyító anyagcsalád első demonstrátorának tekinthető, amely előnyös tulajdonságainak köszönhetően ígéretes alkalmazási lehetőséget kínál a gyógyászat területén, illetve újrafelhasználható csomagolóanyagként elősegítheti a biológiailag nem lebomló műanyag hulladékok jelentette környezetterhelés mérséklését is.

# 2021. ÉVI KÉMIAI ELŐADÓI NAPOKAT TÁMOGATTÁK

Magyar Kémikusok Egyesülete



Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoport



Szegedi Tudományegyetem



**Kémiai Intézet**

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM Természettudományi és Informatikai Kar