



# **MKE 4. NEMZETI KONFERENCIA 2023**

**EGER**

**Eszterházy Károly Katolikus Egyetem  
2023. július 10-12.,**



**PROGRAM ÉS ELŐADÁSÖSSZEFOGLALÓK**

# TÁMOGATÓK



Platina Támogató



RICHTER GEDEON

Platina Támogató



Arany Támogató



Ezüst Támogató

---

# KIÁLLÍTÓK



ABL&E-JASCO  
Magyarország Kft.



S I I I K O N

METTLER TOLEDO



DONAU LAB Budapest  
Member of LPPgroup



unitester

---

# HIRDETŐ

***ECO-Invest Kft.***

# **MKE 4. Nemzeti Konferencia 2023**

**Program és előadásösszefoglalók**

**Eger**

**Eszterházy Károly Katolikus Egyetem**

**2023. július 10-12.**

**Kiadja: Magyar Kémikusok Egyesülete**

**ISBN 978-615-6018-18-2**



# Tartalomjegyzék

Bizottságok .....	4
Beköszöntő .....	5
Program.....	6
Plenáris előadások.....	15
Meghívott előadók.....	26
Kerekasztal.....	33
Szóbeli előadások.....	35
Poszterek .....	58

# **Bizottságok**

## **Szervezőbizottság:**

**Simonné Sarkadi Livia** – a konferencia elnöke

**Mika László Tamás** – a konferencia titkára

## **Tudományos Szervezőbizottság:**

**Adányiné Kisbocskói Nóra**

**Kardos Zsuzsanna**

**Keglevich György**

**Mihucz Viktor**

**Murányi Zoltán**

**Szalay Péter**

## MKE 4. Nemzeti Konferencia 2023

### „Innováció – alapkutatótól a megvalósításig”

#### MKE 4. Nemzeti Konferencia 2023. július 10-12. Eger

Magyar Kémikusok Egyesülete 2011-ben a Kémia Nemzetközi Évében Sopronban indította útjára új konferenciasorozatát „MKE Nemzeti Konferencia” néven. A négyévenkénti gyakorisággal megrendezendő a konferenciák célja, hogy a magyar kémikusok által képviselt sokszínű szakmai tudás a kutatás, ipari gyakorlat és oktatás területéről megismertetése kerüljön kémikusok tág közösségével.

Az elmúlt egy évtized alatt a konferencia rendezvényei rendre a kémiát érintő nemzetközi évek ünnepi eseménysorozatának részei voltak. Az MKE 2. Nemzeti Konferencia 2015-ben Fény Nemzetközi Éve programsorozathoz kapcsolódva Hajdúszoboszlón került megrendezésre. A harmadik Nemzeti Konferenciát 2019-ben a Periódusos Rendszer Nemzetközi Évében, Egerben tartottuk.

Az MKE 4. Nemzeti Konferenciáját az idén ismét Egerben tartjuk 2023. július 10-12. között, amelynek a mottója „Innováció – alapkutatótól a megvalósításig” Minden érdeklődőt szeretettel várunk.



**Prof. Dr. Simonné Sarkadi Livia**  
a Konferencia elnöke

**Vegyészkonferencia 2023**  
**2023 július 10-12.**  
**Eszterházy Károly Katolikus Egyetem, Eger**

## Program

### 2023.07.10. hétfő

- 08:00 Regisztráció
- 10:30 - 10:55 **Megnyitó**
- Elnök: Mika László Tamás*
- 10:55 - 11:00 **Náray-Szabó István Tudományos Díj átadása**
- 11:00 - 11:30 PL1 **Kotschy András** – *Servier Kutatóintézet Zrt.*  
Egymásra utalva – az alapkutatás jelentősége az originális gyógyszerkutatásban
- 11:30 - 11:50 O1 **Timári István, Farkas László Bence, Balogh Alex Kálmán, Högye Fanni, Illyés Tünde Zita, Fehér Krisztina, Helen Blanchard, Szilágyi László, E. Kövér Katalin** - *Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék*  
Szénhidrát-lektin kölcsönhatás vizsgálata korszerű NMR és in silico módszerekkel
- 11:50 - 12:10 O2 **Bálint Erika, Orosz János Máté, Ujj Dóra, Rávai Bettina, Petr Kasal, Benkovics Gábor, Mátravölgyi Béla** - *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék*  
Áramlásos kémia a ciklodextrinek és a kapszaicinoidok világában
- 12:10 - 12:30 O3 **József János, Vágvölgyiné Tóth Marietta, Illyés Tünde Zita, E. Kövér Katalin, Somsák László, Juhász László** - *Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék*  
Exo-glikál származékok tiol-én és [2+2] típusú cikloaddíciós reakcióinak vizsgálata
- 12:30 - 12:50 O4 **Dénes Noémi, Gyuricza Barbara, Képes Zita, Hajdu István, Jószi István, Trencsényi György, Kertész István** - *Debreceni Egyetem, ÁOK, Orvosi Képző Intézet, Nukleáris Medicina Tanszék*  
Radiojelölt vegyületek fejlesztése és felhasználásuk PET képző céljából
- 13:00 - 14:30 **Ebéd**

*Elnök: Bálint Erika*

14:30 - 15:00 PL2 **Soós Tibor** - *Magyar Kutatási Hálózat, Természettudományi Kutatóközpont*  
Sztintézis fémek nélkül, csupán kényszer, avagy új innovációs lehetőség?

15:00 - 15:20 M1 **Keserű György Miklós** - *Gyógyszerinnovációs Központ, Nemzeti Gyógyszerkutató és Fejlesztési Laboratórium, Természettudományi Kutatóközpont*  
A kovalens fragmensek alkalmazása terápiás célpontok validálásában

15:20 - 15:40 M2 **Csapó Edit** - *MTA-SZTE Lendület Nemesfém Nanoszerkezetek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék*  
A nanoszerkezetű arany: elektrokatalizátorok fejlesztésétől az orvosbiológiai alkalmazásokig

15:40 - 16:00 M3 **Tarcsay György** - *ELTE TTK Kémiai Intézet*  
Laboratóriumi asztrokémia, az extrém körülmények kémiája

16:00 - 16:30 **Kávészünet / poszter**

*Elnök: Szalay Péter*

16:30 - 17:00 PL3 **Barta Katalin** - *Institute of Chemistry, University of Graz*  
Komplexitás és atomhatékonyság a megújuló nyersanyagok világában

17:00 - 17:20 O5 **Hollóczki Oldamur, Kovács Tibor** - *Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*  
Nanoműanyagok és biomolekuláris rendszerek kölcsönhatásának vizsgálata

17:20 - 17:40 O6 **Tarcsay György** - *ELTE TTK Kémiai Intézet*  
SuperSmartLab az ELTÉ-n: XXI. századi laborkörnyezet, technológia, oktatási módszerek és hallgatói kompetenciák

17:40 - 18.40 K1 **Kerekasztal** a kémia oktatásról  
Moderátor: Murányi Zoltán

*Elnök: Szántay Csaba*

18:40 - 20:00 **Flash poszter bemutató – P2, P4, P6, P10, P11, P12, P14, P19, P21, P22, P27, P34, P37**

**Poszter**

20:00 **Üdvözlő fogadás**

## 2023.07.11. kedd

- Elnök: Keserű György*
- 09:00 - 09:30 PL4 **Diószegi Zsuzsanna** - *EUROAPI Hungary Kft.*  
Bemutatkozik az EUROAPI
- 09:30 - 09:50 O7 **Morvai Miklós, Sőregi Nagy Dávid, Szabó András, Heim Krisztián** - *EUROAPI Hungary Kft.*  
Az azido szennyezők szerepe az Irbesartan gyártási technológiájának módosításában
- 09:50 - 10:10 O8 **Buzder-Lantos Péter** - *EUROAPI Hungary Kft.*  
CONTROL TOWER - avagy a mesterséges intelligencia a gyógyszeripari termelésben
- 10:10 - 10:30 O9 **Hudáky Péter** - *EUROAPI Hungary Kft.*  
Adatalapú fejlesztés – Statisztika a vegyipar 4.0-ban
- 10:30 - 10:50 O10 **Rádai Zita, Meleg Ildikó, Póti Judit, Takács László, Hortobágyi Irén** - *EUROAPI Hungary Kft.*  
Beraprost nátrium abszolút konfigurációjának alátámasztása királis analitikai módszerekkel
- 10:50 - 11:20 **Kávészünet / poszter**
- Elnök: Sarkadi Livia*
- 11:20 - 11:50 PL5 **Stella A. Ordoudi** - *Laboratory of Food Chemistry and Technology, School of Chemistry, Aristotle University of Thessaloniki*  
Modern applications of mid-infrared spectroscopy in food science and technology: from molecular structure elucidation to process monitoring and quality control
- 11:50 - 12:10 O11 **Tormási Judit, Berki Mária, Lengyel Kónya Éva, Tömösköziné Farkas Rita, Abrankó László** - *Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet, Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék*  
Élelmi fehérjék tápértékbecslése emésztésszimulációval.
- 12:10 - 12:30 O12 **Tömösköziné Farkas Rita, Berki Mária, Lengyel Kónya Éva, Adányiné Kisbocskói Nóra, Horváthné Szanics Enikő** - *MATE, Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet, Élelmiszertudományi Kutatócsoport*  
Rovarok aminosav- és kitin-tartalom vizsgálata
- 12:30 - 12:50 O13 **Lengyel-Kónya Éva, Gebremichael Askale, Kucska Balázs, Ardó László, Bíró Janka, Berki Mária, Tömösközi-Farkas Rita, Egessa Robert, Müller Tamás, Gyalog Gergő, Jakab-Sándor Zsuzsanna** - *Élelmiszertudományi Kutatócsoport, Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, BC*  
Új takarmányösszetevők hatása afrikai harcsa ivadékok növekedésére

- 12:50 - 13:10 O14 **Joseph Sneddon, Chad A. Thibodeaux, Viktor G. Mihucz** - *Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemistry, ELTE – Eötvös Loránd University*  
Toxic metals and metalloids in seafood
- 13:10 - 14:40 **Ebéd**  
*Elnök: Kotschy András*
- 14:40 - 15:10 PL6 **Bogsch Erik - Richter Gedeon Nyrt.**  
Biotechnológiai gyógyszerek – áttörés a gyógyászatban
- 15:10 - 15:15 **Kálmán Alajos Tudományos Díj átadása**
- 15:15 – 15:35 M4 **Bényei Attila** – *Debreceni Egyetem*  
Egykristály röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat Debrecenben
- 15:35 - 16:05 PL7 **Fittschen Ursula, Thomas Schirmer, Sven Hampel, Alena Schickman Sophie Wunderlich** – *Institute of Inorganic and Analytical Chemistry, Clausthal University of Technology*  
Understanding the incorporation of critical elements into recoverable compounds in pyrometallurgical slags
- 16:05 - 16:35 **Kávészünet / poszter**  
*Elnök: Murányi Zoltán*
- 16:35 - 16:55 O15 **Mohammed Ahmed Shehab, Németh Zoltán** - *Miskolci Egyetem, Korszerű Anyagok és Intelligens Technológiák Felsőoktatási és Ipari Együttműködési Központ,*  
TiO<sub>2</sub> és WO<sub>3</sub> nanoszál alapú hibrid membránok toxikológiai vizsgálata
- 16:55 - 17:15 O16 **Illés Ádám, Esther Orenibi<sup>a</sup>, Záray Gyula** - *Ökológiai Kutatóközpont, Vízi Ökológiai Intézet*  
A per- és polifluorozott szénhidrogénszármazékok (PFAS) vizsgálata a Duna magyarországi szakaszán
- 17:15 - 17:35 O17 **Dobosy Péter, Nguyen Thi Phuong Hoang, Záray Gyula, Endrédi Anett, Christina Strelí, Dieter Ingerle, Philipp Ziegler, Martin Radtk, Ana Guilherme Buzanich, Fodor Ferenc** - *Ökológiai Kutatóközpont, Vízi Ökológiai Intézet*  
Jód akkumuláció vizsgálata vízkultúrában nevelt káposzta növényekben
- 17:35 - 17:55 O18 **Dudás Zsolt, Menyhért Balázs** - *MOL Nyrt Poliolefin R&D Recycling Team*  
Csodaszerek a visszaolgozott anyag tartalmú poliolefinnek tulajdonságainak javítására
- 18:00 - 19:00 K2 **Kerekasztal: A környezetvédelem aktuális kérdései: akkumulátorgyártás, elektromobilitás**  
Vitaindító: Ágoston Csaba, Domokos Endre, Nagy Sándor
- 20:00 **Díszvacsora**

## 2023.07.12. szerda

- Elnök: Adányiné Kisbocskói Nóra*
- 09:00 - 09:30 PL8 **Lee Yong, Shavkatjon Azizov** - *Anastro Laboratory, Institute of Basic Science, Changwon National University*  
Novel optosensing strategies for trace biochemical molecules using functionalized nanomaterials
- 09:30 - 09:50 O19 **Homoki Zsolt, Szigeti Ágnes, Osváth Szabolcs** - *Nemzeti Népegészségügyi Központ, Sugárbiológiai és Sugáregészségügyi Főosztály*  
A magyarországi épületek radon-felmérése
- 09:50 - 10:10 O20 **Alapi Tünde, Farkas Luca, Szirmai Adrienn** – *Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék*  
A VUV fotonok szerepének vizsgálta trimetoprim vizes oldatának UV/VUV/PDS eljárással való kezelése során
- 10:10 - 10:30 O21 **Davaakhuu Tserendorj, Károlyi Ágnes, Szalai Rita, Illés Ádám, Baranya Sándor, Dobosy Péter, Záray Gyula** - *Ökológiai Kutatóközpont, Vízi Ökológiai Intézet*  
Kommunális szennyvíztisztító általi mikroműanyag és textilszál emisszió
- 10:30 - 11:00 **Kávészünet**
- Elnök: Mihucz Viktor*
- 11:00 - 11:05 **Török Tibor Medal Award Lecture**
- 11:05 - 11:35 PL9 **D'Ulivo Alessandro** - *CNR, Institute of Chemistry of Organometallic Compounds*  
Vapor generation techniques for trace element analysis. Fundamental aspects and applications.
- 11:35 - 11:55 M5 **Galbács Gábor** - *Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen, Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék*  
Mikroanalitikai fejlesztések a lézer indukált plazma spektroszkópiában
- 11:55 - 12:15 M6 **Schlosser Gitta** – *ELTE TTK*  
Innovatív klinikai megoldások támogatása ionmobilitás-tömegspektrometriával
- 12:15 - 12:35 O22 **Kéri Mónika, Nyul Dávid, Papp Vanda, Novák Levente, Bányai István** - *Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*  
Porózus anyagok jellemzése NMR relaxációs módszerekkel
- 12:35 - 13:05 PL10 **Eva Kočiřová, Alžbeta Kuiřová, Ondřej Kylián, Marek Procházka** - *Division of Biomolecular Physics, Institute of Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University*  
Sensitive detection of biomolecules and biologically important molecules by drop coating deposition RAMAN (DCDR) spectroscopy
- 13:05 - **ZÁRSZÓ**

## Poszter szekció

2023. július 10-11.

- P1 **Nani Apriyani, Marta Keller, Anikó Vasanits, Szabolcs Béni, Andrea Cattaneo, Victor G. Mihucz** - *Semmelweis University Department of Pharmacognosy*  
Suitability of ultra performance liquid chromatography for determination of polycyclic aromatic hydrocarbons from cooking emissions
- P2 **Tímea Baló, Tímea Szabó, Virginie Martiny, András Herner, David Brown, Zhuoyao Chen, Alex Bullock, András Kotschy** - *Servier Research Institute of Medicinal Chemistry/ Eötvös Lóránd University*  
Application of photo-crosslinkers for mapping KBTBD4-ligand interaction
- P3 **Batha Bálint, Schwaiger Stefan, Hochegger Markus, Barta-Weissert Katalin** - *University of Graz*  
Következő generációs, megújuló tenzidek: szintézis és méretnövelés
- P4 **Benes Eszter Luca, Fodor Marietta, Gere Attila** - *Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék*  
Coffea arabica roncsolásmentes vizsgálata a zöld kávétól az italig
- P5 **Buczko Noémi Anna, Maróti Boglárka, Gméling Katalin, Szentmiklósi László** - *Energiatudományi Kutatóközpont Energia- és Környezetbiztonsági Intézet Nukleáris Analitikai és Radiográfiai Laboratórium*  
Elektronikus hulladékok elemösszetételének vizsgálata nukleáris analitikai módszerekkel
- P6 **Covic Anett, Csaplár Constance, Farkas Luca, Alapi Tünde** - *Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék*  
Gyógyszer hatóanyagok vizes oldatának kezelése UV/klór eljárásokkal
- P7 **Csorba Noémi, Petri László, Ábrányi-Balogh Péter, Keeley Aaron, Simon József, Randelović Ivan, Tóvári József, Schlosser Gitta, Szabó Dániel, Drahos László, Keserű György Miklós** - *Természettudományi Kutatóközpont, Gyógyszerkémiai Kutatócsoport*  
Szulfonil-fluoridok alkalmazása a fragmens-alapú gyógyszerkutatásban
- P8 **Csutorás Csaba, Bajzát Judit, Sándorné Szőke Amanda, Rác József** - *Eszterházy Károly Katolikus Egyetem*  
Csiperkegomba alacsony hőmérsékletű hőkezelésének vizsgálata
- P9 **Misz András, Bajzát Judit, Sándorné Szőke Amanda, Visnyei Marianna, Allaga Henrietta, Kredics László, Vágvölgyi Csaba, Csutorás Csaba** - *Eszterházy Károly Katolikus Egyetem*  
Gombatermesztésben alkalmazott takaróanyagok fejlesztése letermelt csiperkegomba komposzt komposztálásával

- P10 **Dargó Gyula, Erdélyi Dóra, Molnár Balázs, Bagi Péter, Kisszékelyi Péter, Kupai József** - *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszék Organokatalízis Kutatócsoport*  
Lipofil, cinkonaalapú organokatalizátor alkalmazása és visszaforgatása a baklofen szintézisében
- P11 **Erdei Réka Pálma, Izsépi László, Batta Gyula** - *Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék*  
A glikopeptid antibiotikumok szerkezete és hatásmechanizmusa: Az eremomicin és az oritavancin NMR vizsgálatai.
- P12 **Farkas László Bence, Timári István, Nagy Tamás Milán, Erdődiné Kövér Katalin, Sørensen Ole Winneche** - *Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*  
Az összefűzött NMR kísérletek alkalmazhatósági előnyei: A NORD (No Relaxation Delay) spektroszkópia
- P13 **Galgóczy Gréta, Paczal Attila, Kotschy András** - *Servier Kutatóintézet Zrt.*  
Spiro származékok enantioszelektív szintézise átmenetifém katalizált reakciók felhasználásával
- P14 **Hógye Fanni, Illyés Tünde Zita, Szilágyi László** - *Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar Szerves Kémiai Tanszék*  
Aralkil szelenoglikozidok és módosított tioidigalaktózidok előállítása
- P15 **Huszár Bianka, Mucsi Zoltán, Szolga Renáta, Szűcs Nóra Ágnes, Keglevich György** - *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék*  
Mikrohullámú körülmények között végbemenő palládium-, nikkel- és rézkatalizált P-C kapcsolási reakciók összehasonlítása
- P16 **Jakab-Nácsa Alexandra, Tamás Bence Benedek, Vanyorek László, Viskolcz Béla, Farkas László** - *BorsodChem Zrt. Technológiai Támogatás*  
Aromás nitrovegyületek katalitikus hidrogénezésére alkalmas katalizátorok fejlesztése az iparban
- P17 **Jakab-Nácsa Alexandra, Korbács Ákos, Harnócz Lilla, Viskolcz Béla, Farkas László** - *BorsodChem Zrt. Technológiai Támogatás*  
Ipari szürkevíz visszaforgatási lehetőségek vizsgálata a LIFE projekt keretén belül
- P-18 **Marta Keller, Davide Campagnolo, Andrea Cattaneo, Cristina Boldorini, Nani Apriyani, Francesca Borghi, Giacomo Fanti, Sabrina Rovelli, Andrea Spinazzé, Carolina Zellino, Victor G. Mihucz, Carlo Dossi, Domenico** - *Department of Science and High Technology, University of Insubria,*  
Source identification of volatile organic compounds and aldehydes in italian restaurant kitchens
- P-19 **Alžbeta Kůžiová, Anna Kuzminova, Ondřej Kylián, Eva Kočišová** - *Charles University, Faculty of Mathematics and Physics Institute of Physics Department of Biomolecular Physics*  
Drop coating deposition Raman Spectroscopy of liposomes

- P-20 **Majerné Baranyi Krisztina, Székács András, Adányiné Kisbocskói Nóra** - Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék  
Optikai hullámvezető fénymódus spektroszkópia (OWLS) alapú módszer fejlesztése a *glyphosate* gyomirtószer-hatóanyag meghatározására
- P-21 **Márton Péter, Nagy Örs Tamás, Kovács Dorina, Szolnoki Beáta, Nagy Norbert, Szabó Gabriella Stefánia, Hórvölgyi Zoltán** - Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék Kolloidkémia Csoport  
Mártással kialakított kitozánbevonatok *N*-acetilezése metanolos közegben: áteresztőképességi vizsgálatok
- P-22 **Nagy Gábor Zoltán, Pölczmann György, Nemesnyik Ákos, Nagy Roland** – MOL-LUB Kft., Kenőanyag Termékfejlesztés  
Alumínium-komplex kenőzsírok alkalmazástechnikai jellemzőinek javítása
- P-23 **Nagy Katalin, Darkó Éva, Janda Tibor, Mohamed Ramadan Rady, Dernovics Mihály** – ELKH Agrártudományi Kutatóközpont, Mezőgazdasági Intézet  
A rózsameténg LED fénnel történő kezelésének hatása a vinca alkaloid bioszintézisútra: metabolomikai megközelítés
- P-24 **Nagy Katalin, Balázs Viktória Bernadett, Varga Emese, Üveges Márta** - ELKH Agrártudományi Kutatóközpont, Mezőgazdasági Intézet  
Alternatív mintaelőkészítési eljárás vanília (*Vanilla planifolia*) aflatoxin szennyezettségének meghatározására UPLC-MS/MS módszerrel
- P-25 **Orosz János Máté, Gyöngyössy Ádám, Rávai Bettina, Mátravölgyi Béla, Bálint Erika** - Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Kapszaicinoidok és heterociklusos analógjaik szintézise áramlásos kémiai rendszerekben
- P-26 **Papp Vanda, Kertész Tamás Péter, Nyul Dávid, Janovics Róbert, Bányai István, Kéri Mónika** - Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék  
Mit ad a kötőanyagok megismeréséhez a folyékony fázisú NMR?
- P-27 **Petri László, Ábrányi-Balogh Péter, Vagrýs Darius, Imre Tímea, Varró Nikolett, Mándity István, Bajusz-Rácz Anita, Wittner Lucia, Tóth Kinga, Tóth Estilla Zsófia Juhász Tünde, Davis Ben, Keserű György Miklós** - Természettudományi Kutatóintézet Gyógyszerkémiai Kutatócsoport  
Kovalens stratégia alkalmazása rendezetlen fehérjék, mint gyógyszerkémiai célpontok esetében: Tau aggregáció gátlók fejlesztése
- P-28 **Rávai Bettina, Németh Áron Soma, Steinsits Dániel, Bálint Erika** - Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Izotinalapú spirooxindol-dihidropiridinek és spiroxantének előállítás

- P-29 **Üveges Márta, Zhang Miaomiao, Simonné Sarkadi Livia, Tormási Judit, Benes Eszter, Vass Réka Anna, Vari G. Sándor** - Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet Táplálkozástudományi Tanszék  
Eltérő laktációs időszakból származó anyatej minták zsírsav-profil vizsgálata
- P-30 **Szabó Kármén, Popovics-Tóth Nóra, Bálint Erika** – Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
2-Alkinilbenzaldehidok, aminok és szekunder foszfin-oxidok háromkomponensű reakcióinak vizsgálata
- P-31 **Bence Szakács, Tímea Kaszás, Tekla Blága, Hina Shafique, Zoárd Ecsedi, Kyle Doherty, Éva Juhász-Tóth, Trinidad Velasco-Torrijos, László Somsák, Marietta Tóth** - Debreceni Egyetem Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar Szerves Kémiai Tanszék  
Anhidro-aldóz oximok átalakítási lehetőségeinek vizsgálata
- P-32 **Szalai Zsuzsanna, Tóth Szigfrid Boldizsár, Bősze Szilvia, Szabó Rita, Ábrányi-Balogh Péter, Keglevich György** - Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Hidroxi-metilénbiszfoszfonátok és származékaik szintézise
- P-33 **Törteli Levente, Simon Péter, Szatmári István** - Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Gyógyszerkémiai Intézet  
C3-funkcionalizált 4-oxo-1,4-dihidrokinolin-2-karbonsavak szintézise és továbbalakításai
- P-34 **Tormási Judit, Abrankó László** - Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem ÉTTI ÉKAT  
Bioaktív komponenseket tartalmazó élelmiszerek hatása a trigliceridek emészthetőségére és a fehérje-emésztésre
- P-35 **Ujj Dóra Viktória, Benkovics Gábor, Petr Kasal, Bálint Erika, Mátravölgyi Béla** - Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszék Innovatív Gyógyszeripari és Kirootechnológiai Kutatócsoport  
Subetadex ciklodextrin pH függő viselkedésének vizsgálata
- P-36 **Varga Bertalan, Orbán István, Rapi Zsolt** - Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
Ciklopropanálási reakciók vizsgálata aszimmetrikus fázistranszfer katalitikus körülmények között
- P-37 **Veres Bence, Alapi Tünde** - Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék  
Peroxodiszulfát hatása a látható és UV fényel gerjeszthető fotokatalizátorok aktivitására

## PLENÁRIS ELŐADÁSOK

## EGYMÁSRA UTALVA – AZ ALAPKUTATÁS JELENTŐSÉGE AZ ORIGINÁLIS GYÓGYSZERKUTATÁSBAN

Kotschy András

*Servier Kutatóintézet Zrt., 1031 Budapest, Záhony utca 7.  
andras.kotschy@servier.com*

Egy originális gyógyszerjelölt felfedezése magas kockázatú, általában 5-7 évig tartó folyamat, amely számos tudományterület szakembereinek a szoros együttműködésén alapul. A gyógyszeripar folyamatosan keresi a lehetőségét annak, hogy e folyamat egyes elemeinek a hatékonyságát javítsa. Mivel ez gyakran alapkutatási tevékenységet jelent, így az egyetemi, akadémiai kutatóhelyek természetes partnerek a folyamatban.

Az előadás során olyan eredmények kerülnek bemutatásra, melyek az alapkutatás és alkalmazott kutatás határmezsgyéjén mozognak, és ahol az ipari és egyetemi/akadémiai szakértelem összefogása kulcsfontosságú volt a kutatási téma sikeressége szempontjából. A kiválasztott témák átfogják a teljes kutatási spektrumot a kémiai kiindulópontok hatékony azonosításától,<sup>1</sup> a vegyületkönyvtárak hatékony szintézisének keresztül,<sup>2</sup> a gyógyszerjelöltek előállításáig bezárólag.<sup>3</sup>

1. Zwillinger, M.; Fischer, L.; Sályi, G.; Szabó, S.; Csékei, M.; Huc, I.; Kotschy, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 19078.

2. Gyorfi, N.; Tasnadi, G.; Gyuris, M.; Kotschy, A. *J. Org. Chem.* **2023**, accepted for publication

3. Sinai, A.; Simko, D.Cs.; Szabo, F.; Paczal, A.; Gati, T.; Benyei, A.; Novak, Z.; Kotschy, A. *Eur. J. Org. Chem.* 2020, 1122.

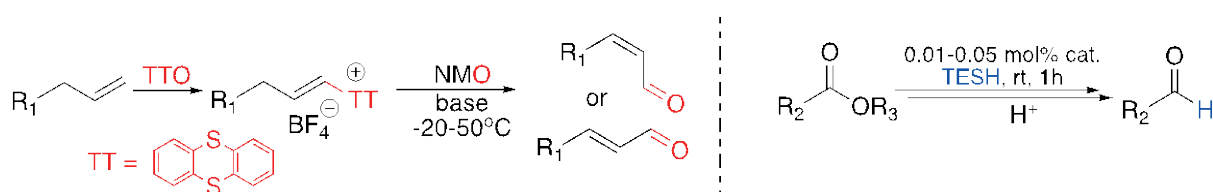
## SZINTÉZIS FÉMEK NÉLKÜL, CSUPÁN KÉNYSZER, AVAGY ÚJ INNOVÁCIÓS LEHETŐSÉG?

Soós Tibor

Magyar Kutatási Hálózat, Természettudományi Kutatóközpont,  
Budapest, Magyar Tudósok krt. 2, H-1117  
soos.tibor@ttk.hu

Az olefinek és észterek nem csupán könnyen hozzáférhető alapanyagok, de e funkcionalitások sokoldalú és szelektív átalakításai kiemelt szerepet kapnak a szerves kémiában. Ennek következtében egyáltalán nem meglepő, hogy számos gyógyszer, mezőgazdasági hatóanyag és természetes vegyület szintézisében gyakran alkalmazzák őket. Az olefin és észter csoportok szelektív transzformációja így kiemelt szerepet kapott az elmúlt néhány évtizedben, azonban ezekben az átalakításokban jellemzően valamilyen fémkatalizátort/reagenst vagy éppen erélyes reakciókörülményeket alkalmaztak.

Az előadásomban két általunk nemrégiben kifejlesztett és széleskörűen alkalmazható fémmentes eljárást mutatok be, amelyek nem csupán fémmentes szintetikus alternatívát jelentenek, de egyben rámutatnak arra is, hogy a fémmentes eljárások akár új, innovatív lehetőséget is teremthetnek a szerves kémiai szintézisekben. A két bemutatásra kerülő szintetikus eljárás az olefinek “én” típusú oxidációja alkenil-tiantrénium sókon<sup>1</sup> keresztül, illetve az észterek szelektív parciális redukciója frusztrált Lewis-pár által<sup>2</sup>. Mindkét módszer technikai kivitelezése egyszerű, olcsó reagensekre épülnek és enyhe körülmények között hajthatók végre a reakciók. Kiemelendő, hogy az észter redukciós eljárásunkat már tonnás léptékben is alkalmazták, amely bizonyítja a módszer gyakorlati értékét is.



1. Angyal, P.; Kotschy, A. M.; Dudás, Á.; Varga, Sz.; Soós, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, e202214096.

2. Soós, T.; Gyömöre, Á.; Dudás, Á.; Fegyverneki, D.; Gyöngyösi, M.; Sőregi, P.; Kolozsvári, N. WO2022/129966.

## KOMPLEXITÁS ÉS ATOMHATÉKONYSÁG A MEGÚJULÓ NYERSANYAGOK VILÁGÁBAN

## COMPLEXITY AND ATOM-ECONOMY IN THE WORLD OF RENEWABLE RESOURCES

**Barta Katalin**

*Institute of Chemistry, University of Graz  
Heinrichstraße 28, 8010 Graz, Austria  
katalin.barta@uni-graz.at*

The valorization of renewable resources and connecting to viable bio-based products is an important research target with view on climate change mitigation and achieving circular economy solutions that contrast the current linear approaches primarily using petrochemicals.<sup>1</sup> This task is challenged by the complexity of renewable resources, that are structurally markedly different from petrochemicals, thus there is need for the development of innovative chemo-catalytic strategies to their depolymerization and subsequent functionalization.<sup>2</sup> Hereby, it is very important to take into account the principles of green chemistry, and overall sustainability of the individual transformations as well as the entire value chain.<sup>3</sup> In essence, we need to create new chemical space in terms of product outcomes, and develop matching catalytic strategies.

In this talk i would like to present our approach that embraces the inherent complexity of renewable resources to develop new depolymmerization, and functionalization strategies, to access value added products with valorization potential such as bio-based polymers, biologically active molecules or amines.<sup>4</sup> Hereby we follow the simple concept 'cleave and couple'.<sup>5</sup> Focus will be devoted to lignocellulosic biomass, and the catalytic valorization of all its constituents, including the most challenging lignin.<sup>6,7,8</sup>

1. Barta, K.; Ford, P. C. *Acc. Chem. Res.* **2014**, *47*, 1503.

2. Questell-Santiago, Y. M.; Galkin, M. V.; Barta, K.; Luterbacher, J. S. *Nat. Rev. Chem.* **2020**, *4*, 311.

3. Sun, Z.; Bottari, G.; Afanasenko, A.; Stuart, M. C. A.; Deuss, P. J.; Fridrich, B.; Barta, K. *Nat. Catal.* **2018**, *1*, 82–92.

4. Wu, X.; Galkin, M. V.; Stern, T.; Sun, Z.; Barta, K. *Nat. Comm.* **2022**, *13*, 3376.

5. Sun, Z.; Barta, K. *Chem. Comm.* **2018**, *54*, 7725.

6. Sun, Z.; Fridrich, B.; Santi, A. de; Elangovan, S.; Barta, K. *Chem. Rev.* **2018**, *118*, 614.

7. Deuss, P. J.; Scott, M.; Tran, F.; Westwood, N. J.; Vries, J. G. de; Barta, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 7456.

8. Lahive, C. W.; Deuss, P. J.; Lancefield, C. S.; Sun, Z.; Cordes, D. B.; Young, C. M.; Tran, F.; Slawin, A. M. Z.; Vries, J. G. de; Kamer, P. C. J.; Westwood, N. J.; Barta, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 8900.

## BEMUTATKOZIK AZ EUROAPI

### Diószegi Zsuzsanna

*Euroapi*

*1045 Budapest, Tó u. 1-5.*

*zsuzsanna.dioszegi@euroapi.com*

Az Euroapi egy 2020. évben megalapított európai alap gyógyszeripari vállalat csoport. Az EUROAPI célja, hogy a gyógyszerhatóanyag gyártó ágazat vezető szereplője legyen Európában és termékeinkkel, szolgáltatásainkkal kielégítsük az ügyfelek igényeit és hozzájáruljunk a betegek jobb életminőségéhez és gyógyulásához szerte a világon.

Innovatív folyamatokat és szolgáltatásokat ajánlunk, amelyek kialakításuknál fogva fenntarthatóak. Biztonságos termékeket és rugalmas és felelősségteljes ellátási láncot kínálunk és kiváló minőségű termékeinkkel arra törekszünk, hogy megbízható partnerek legyünk a gyógyszeripari ellátási láncban. Jelenleg világelsőek vagyunk a kis molekulájú gyógyszer hatóanyagok gyártása terén.

A prosztoglandin fejlesztésben és gyártásban világvezetők vagyunk. Erős innovációs és kutatásfejlesztési képességeink lehetővé teszik számunkra, hogy CDMO (szerződéses fejlesztés és gyártás) tevékenységeink révén a partnereink sikeréhez mi is hozzájáruljunk.

Magyarországon történelmi hagyománya van a gyógyszergyártásnak, az Euroapi is több céges átalakulás után vált az egyik legnagyobb hatóanyaggyártóvá. 2023-ban a termelés, kutatás-fejlesztés és informatikai belső szolgáltatásaival együtt a magyarországi egység eléri az 1000+ fő munkatársi létszámot.

## MODERN APPLICATIONS OF MID-INFRARED SPECTROSCOPY IN FOOD SCIENCE AND TECHNOLOGY: FROM MOLECULAR STRUCTURE ELUCIDATION TO PROCESS MONITORING AND QUALITY CONTROL

**Stella A. Ordoudi**

*Laboratory of Food Chemistry and Technology, School of Chemistry, Aristotle University of Thessaloniki, 54124, Thessaloniki, Greece  
steord@chem.auth.gr*

Nowadays, advances in the instrumentation of various vibrational spectroscopic techniques (Near-, mid- and Far-infrared, Raman, hyperspectral imaging), powerful signal processing and chemometric methods, easy-to-use software, and IoT systems are shaping the future of green analytical chemistry. As vital parts of the so-called Process Analytical Technology, these non-destructive techniques are expected to change dramatically the industrial quality control in food processing<sup>1</sup>. Moreover, they offer great potential to be implemented as rapid screening and decision-making tools in official food controls. The new approaches are defined as green because of intrinsic simplicity, speed, and non-destructive properties along with low cost, minimal sample preparation, and minimal toxic waste production. Within this rapidly evolving landscape, Fourier Transform Mid-Infrared spectroscopy (FTIR), a fundamental tool of molecular structure elucidation, is flourishing. In the last decades, its applications have widely shifted from qualitative studies of chemical reactions in simple model solutions to the investigation of physical and biochemical interactions in biological tissues (plants, microbes, animals) or compositional studies of processed foods and beverages<sup>2</sup>. Above all, engaging chemometrics as an a priori holistic approach in analyzing large spectral data sets is crucial to extracting insightful information and addressing complicated issues of food authenticity, safety, and nutritional quality. In this work, a perceptive account will be undertaken to highlight some food research areas where FTIR spectroscopic-based methods show the greatest prospect for further knowledge development. Potential applications of FTIR spectroscopy to monitor several steps in the production and supply chain of saffron, an aromatic plant product of great economic value in the global spice trade, will be discussed as a case study.

- (1) Skibsted, E.; Engelsen, S. B. *Spectroscopy for Process Analytical Technology (PAT)*, 3rd ed.; Elsevier Ltd., 2017. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803224-4.00026-1>.
- (2) Aleixandre-Tudó, J. L.; Castelló-Cogollos, L.; Aleixandre, J. L.; Aleixandre-Benavent, R. *Appl. Spectrosc. Rev.* **2020**, *55* (9), 873–906. <https://doi.org/10.1080/05704928.2019.1694936>.

## BIOTECHNOLÓGIAI GYÓGYSZEREK – ÁTTÖRÉS A GYÓGYÁSZATBAN

**Bogsch Erik**

*Biotechnológiai Üzletág Vezető  
Richter Gedeon Nyrt., 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21  
drbogsch@richter.hu*

A biotechnológiai gyógyszerek – biologikumok – az utóbbi negyed évszázadban különösen fontos áttörést hoztak bizonyos betegségek kezelésében, ahol a 'hagyományosabb' kismolekula alapú terápiák kevésbé bizonyultak hatékonyak.

A gyógyszerpiac szegmens egyre nagyobb területét fedik le a biológiai alapú készítmények. A fehérje alapú terápiákon felül a legújabb sejt és génterápiás eljárások is a biotechnológiai kategóriában foglalnak helyet.

A biologikumok előállításuk komplex, többségében fermentációs alapú technológiákra épül, a fehérjék komplexitásától függően rekombináns mikrobiális, illetve emlőssejt tenyészeteket használva. A fehérje molekulák karakterizálása is nagyon összetett és szerteágazó, így a biotechnológiát támogató analitikai tudás, módszerek és eszközök is nagyon széles nyomtávot fednek le.

Az előadás célja, bemutatni a biotechnológiai terápiák széles spektrumát, a biotechnológiai gyógyszerfejlesztés főbb elemeit, továbbá kitérni a bioszimiláris/biohasonló gyógyszerek fejlesztési és szabályozási kihívásaira, mindazonáltal ezzel lehetőséget teremtve, hogy egyre több beteg részesüljön a leghatékonyabb biológiai terápiákban.

## UNDERSTANDING THE INCORPORATION OF CRITICAL ELEMENTS INTO RECOVERABLE COMPOUNDS IN PYROMETALLURGICAL SLAGS

**Ursula Fittschen<sup>a</sup>, Thomas Schirmer<sup>b</sup>, Sven Hampel<sup>a</sup>, Alena Schickmann<sup>b</sup>,  
Sophie Wunderlich<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Institute of Inorganic and Analytical Chemistry, Clausthal University of Technology, 38678 Clausthal-Zellerfeld, Arnold Sommerfeld Str. 4, Germany*

<sup>b</sup> *Institute of Disposal Research, Clausthal University of Technology, 38678 Clausthal-Zellerfeld, Adolph Roemer Str. 2a, Germany  
ursula.fittschen@tu-clausthal.de*

Pyrometallurgical slags are a valuable secondary resource for several technologically important *i.e.* critical elements. The term “critical” describes materials and elements which are both of high economic importance and have a high risk of supply disruption. Examples of CRMs include rare earth elements, cobalt and niobium. A feasible cost efficient recovery depends on the incorporation of the element of interest into the different compounds of the slag but also on the habitus and size of the grains. Ideally, the element is concentrated in a single phase having advantageous properties for recovery. Optimization of slag system and cooling conditions could allow this kind of enrichment of a desired element in only one compound *i.e.* an engineered artificial mineral (EnAM).

We have studied the formation of potential EnAMs for the recovery of Li from battery recycling slags and slag analogs.  $\text{LiAlO}_2$ <sup>1</sup> as well as  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$ <sup>2</sup> were identified as promising EnAMs. Unfortunately, if both Mn and Al are present in the slag besides  $\text{LiAlO}_2$  a plethora of spinel solid solutions are formed<sup>3</sup>. Accordingly, it is advisable to eliminate either Mn or Al from the system. Modern Li-ion battery cathodes increasingly contain Mn *e.g.* in mixed Ni-Mn-Co oxide materials (NMCs), which are mostly more long lived and more cost efficient. Hence, a Mn-EnAM is our preferred Li scavenger.

The formation of the  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  requires an oxidizing environment to obtain the  $\text{Mn}^{4+}$  oxidation state. Preliminary experiments in ambient air atmosphere show that in a Ca-Si system Mn is found in two oxidation states  $\text{Mn}^{2+}$  and  $\text{Mn}^{3+}$ . Similar diversity of oxidation states was found for vanadium in BOF slags<sup>4</sup>. Here,  $\text{V}^{3+}$ ,  $\text{V}^{4+}$ , and  $\text{V}^{5+}$  were identified. For a knowledge based design of slags it is necessary to understand the processes leading to this diversity. Here we present the synthesis and characterization of slag analogs and discuss hypotheses explaining the observed phenomena.

1. Elwert, T.; Strauss, K.; Schirmer, T.; Goldmann, D.; *World Metall. -Erzmetall* **2012**, 65, 163–171.
2. Longo, R. C.; Kong, F. T.; Santosh, K. C.; Park, M. S.; Yoon, J.; Yeon D.-H.; Park, J.-H.; Doo, S.-G.; Cho, K.; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2014**, 16, 11218.
3. Wittkowski, A.; Schirmer, T.; Qiu, H.; Goldmann, D.; Fittschen, U.E.A.; *Metals* **2021**, 11, 188.
4. Wunderlich, S.; Schirmer, T.; Fittschen, U.E.A.; *Metals* **2021**, 11, 1869.

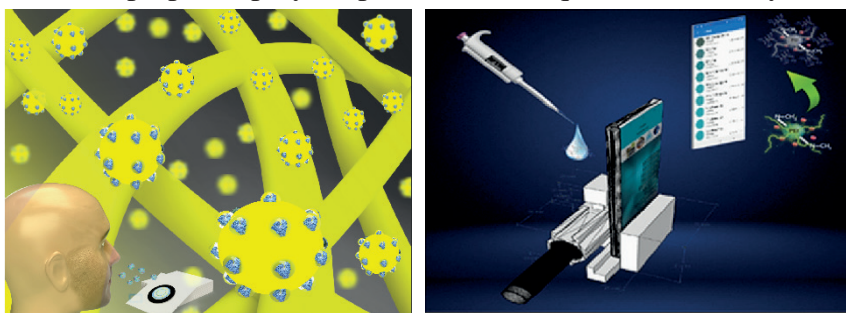
## NOVEL OPTOSENSING STRATEGIES FOR TRACE BIOCHEMICAL MOLECULES USING FUNCTIONALIZED NANOMATERIALS

**Yong-Ill Lee<sup>a,b</sup>, Shavkatjon Azizov<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Anastro Laboratory, Institute of Basic Science, Changwon National University, Changwon 51140, Republic of Korea*

<sup>b</sup> *Department of Pharmaceutical Sciences, Pharmaceutical Technical University, Tashkent 100084, Republic of Uzbekistan*  
*E-mail: yilee@changwon.ac.kr*

Developing ultrasensitive, low-cost, and easy-to-use optosensing strategies for trace amounts of biochemical compounds and the early detection of cancer biomarkers is an attractive trend that should be seen as a rewarding challenge. Although several analytical methods have been used for these purposes, most of them are expensive, less sensitive, time consuming, and complex to handle for on-site detection. Utilizing paper as a substrate to develop bio/chemical sensors is attractive because the resources required to produce them are minimal and the materials are ubiquitous and inexpensive. We have developed highly sensitive and selective sensors based on novel nanohybrids, novel multiple emitting amphiphilic conjugated polythiophene-coated quantum dots (QDs) for pictogram determination of 2,4,6-trinitrophenol explosive and fluorescence molecularly imprinting conjugated polythiophene for cancer biomarkers with LODs of 15 fg/mL for  $\alpha$ -fetoprotein (AFP) and 3.5 fg/mL for carcinoembryonic antigen (CEA). More importantly, we successfully proposed the feasibility of integrating printed paper with a low-cost and sensitive smartphone and prototype electronic device readout that could be applied as rapid point-of-care cancer detection. Modern inkjet printers support the creation of precise and contactless deposition of microscopic sized droplets of the chemical sensor onto paper. I will also present several versions of fluorescence “Turn on–off” and surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) sensors based on nanohybrid materials coated with amphiphilic polythiophenes for the quantitative analysis of environmental and biological samples. We believe that our optosensing approaches represents a significant step forward in the advancement of cost-effective, portable, point-of-care diagnostics.



1. Tawfik, S.M.; Sharipov, M.; Kakhkhorov, S.; Lee, Y.I. *Advanced Science* **2019**, *6*, 1801467.
2. Tawfik, S.M.; Elmasry, E.R.; Sharipov, M.; Lee, Y.I. *Biosensors and Bioelectronics* **2020**, *160*, 112211.
3. Nghia, N.N.; Huy, B.T.; Khanh, D.N.N.; Cuong, N.V.; Li, H.; Lee, Y.I. *Food Chemistry* **2023**, *410*, 135466.
4. Sharipov, M.; Kakhkhorov, S.A.; Liu, H.G.; Tawfik, S.M.; Azizov, S.; Lee, Y.I. *Sensors and Actuator B: Chemical*, submitted.

## VAPOR GENERATION TECHNIQUES FOR TRACE ELEMENT ANALYSIS. FUNDAMENTAL ASPECTS AND APPLICATIONS.

Alessandro D'Ulivo

*CNR, Institute of Chemistry of Organometallic Compounds, S.S. of Pisa, Italy  
alessandro.dulivo@cnr.it*

Vapor generation (VG) techniques coupled with atomic and mass spectrometry are one of the most powerful analytical tools for determination and speciation of trace elements.<sup>1,2</sup> The development of CV techniques was adopted to overcome the low efficiency of sample introduction of nebulization systems (< 5%) and the low efficiency of atom production in flames for some elements (e.g., < 0.5% for Ge, Sn, As, Sb, Se, Te, Hg). VG techniques consist of aqueous phase derivatization reactions that convert the elements to volatile species, thus allowing an efficient and rapid separation from the sample matrix.

VG can be achieved through chemical, photochemical, electrochemical, sonochemical and plasma induced reactions. Among them, chemical VG (CVG) was the first to be used in atomic spectroscopy in 1969 and has since become very popular. Aqueous NaBH<sub>4</sub>, first applied to CVG of Hg, As and Sb in 1972, is undoubtedly the most largely employed reagents. It allows the conversion of the element (Ge, Sn, Pb, As, Sb, Bi, Se) to hydrides or free atoms (e.g., Hg, Cd). More recently, its scope has been expanded to transition and noble metals, which are converted to volatile species as nanoparticles or other species the identity of which is still unknown or controversial.

Although thousands of research papers and many regulated analytical methods are based on CVG by NaBH<sub>4</sub>, the overall approach to CVG has remained completely empirical for many years after the first applications. More recent studies, presented in this lecture, have allowed the understanding of the mechanisms that govern CVG by THB, contributing to the clarification of controversial aspects and the removal of erroneous concepts.<sup>3,4</sup> The rationalization of the fundamental aspects of CVG can give the impetus to further developments which are of relevance in analytical applications of CVG. Among them, the better control of interferences arising from foreign species and the better comprehension of the role played by chemical additives, which are largely employed to modify the reactivity of several CVG systems.

1. Dědina, J., Tsalev, D. *Hydride Generation Atomic Absorption Spectrometry*; John Wiley & Sons: Chichester, 1995.
2. D'Ulivo, A., Sturgeon, R.E. *Vapor Generation Techniques for Trace Element Analysis. Fundamental Aspects*; Elsevier: Amsterdam, 2022.
3. D'Ulivo, A. *J. Anal. At. Spectrom.* **2019**, *34*, 823-847.
4. D'Ulivo, A., Dědina, J., Mester, Z., Sturgeon, R.E., Wang, Q., Welz, B. *Pure Appl. Chem.* 2011, *83*, 1283-1340.

## SENSITIVE DETECTION OF BIOMOLECULES AND BIOLOGICALLY IMPORTANT MOLECULES BY DROP COATING DEPOSITION RAMAN (DCDR) SPECTROSCOPY

Eva Kočíšová<sup>a</sup>, Alžbeta Kuižová<sup>a</sup>, Ondřej Kylián<sup>b</sup>, Marek Procházka<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Division of Biomolecular Physics, Institute of Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Ke Karlovu 5, 121 16 Prague 2, Czech Republic*

<sup>b</sup> *Department of Macromolecular Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague 8, Czech Republic*  
*Email of presenting author: kocisova@karlov.mff.cuni.cz*

The drop coating deposition Raman (DCDR) scattering technique is a relatively new method based on drying of a small drop (2-5  $\mu\text{l}$ ) of molecular solution or suspension deposited on a special hydrophobic substrate. The drying process of the drop very efficiently accumulates the molecules of interest into the pattern from which Raman spectrum of very good quality can be measured. The hydrophobic substrate enables to dry the droplet in a manner of either “coffee-ring effect” or a small often somewhat spherical pattern without a clear peripheral ring. In the former case the dispersed material is carried by the flow of a liquid in the evaporating droplet to its edge where it forms a ring.<sup>1</sup> Latter case was proposed as a universal “solvent removal” method applicable to samples in aqueous solutions deposited on highly hydrophobic surfaces.<sup>2</sup> Both approaches make possible to measure Raman signal not only from small volumes but also from low initial concentrations by using confocal Raman microspectrometer.

The lecture will focus on the introduction of the principle, short history and possible application of the DCDR technique with emphasis on a detection of biologically important molecules and their mixtures. Importance of the DCDR hydrophobic substrates and possibilities of commercially available ones will be discussed. An attempt to improve the method led to the development of the novel type of surfaces with metallic nanoparticles. Their preparation is based on nanostructuring of magnetron sputtered hydrophobic C:F films by a base layer of metallic nanoparticles that were fabricated employing a gas aggregation source of original construction. The surface roughness of resulting coatings has a strong influence of on surface wettability and properties of formed dried patterns. DCDR spectra of a set of molecules including lipids, porphyrins, environmental pesticides (thiram, bentazon), dipicolinic acid as anthrax marker will be presented.<sup>3-7</sup> In addition, an example of the detection of the food contaminant melamine in a real sample of milk infant formula that was intentionally contaminated will be demonstrated.

1. Deegan, R.D.; Bakajin, O.; Dupont, T.F.; Huber, G.; Nagel, S.R.; Witten, T.A. *Nature* **1997**, *389*, 827.
2. Larmour, I.A.; Gray, J.P.E.D.; Bell, S.E.J. *Spectroscopy Europe/World* **2009**, *21*, 6.
3. Kočíšová, E.; Procházka, M. *J. Raman Spectrosc.* **2011**, *42*, 1606.
4. Kočíšová, E.; Procházka, M. *J. Raman Spectrosc.* **2018**, *49*, 2050.
5. Kuižová, A.; Přikryl, M.; Procházka, M.; Kočíšová, E. *Spectrochimica Acta Part A* **2021**, *262*, 120109.
6. Kuižová, A.; Kuzminova, A.; Kylián, O.; Kočíšová, E. *Polymers* **2021**, *13*, 4023.
7. Kuižová, A.; Kočíšová, E. *J. Raman Spectrosc.* **2023**, *in print*.

## MEGHÍVOTT ELŐADÓK

## A KOVALENS FRAGMENTEK ALKALMAZÁSA TERÁPIÁS CÉLPONTOK VALIDÁLÁSÁBAN

**Keserű György Miklós**

*Gyógyszerinnovációs Központ, Nemzeti Gyógyszerkutató és Fejlesztési Laboratórium,  
Természettudományi Kutatóközpont, Budapest  
keseru.gyorgy@ttk.hu*

A kisméretű, poláris és elektrofil csoportot tartalmazó molekulákként jellemezhető kovalens fragmentekkel egyesíthetőek a fragment alapú megközelítések és a kovalens hatásmechanizmus előnyei a gyógyszerkutatás korai fázisában. A fragmentek hatékonyan mintavételezik a kötőhelyeken releváns kémiai teret, így segítségükkel nehezen célozható kötőhelyek (PPI, transzkripció faktorok, RNS, alloszterikus és eltemetett zsebek) is azonosíthatóak [1]. A fragmentek ugyanakkor kis méretük miatt csak gyengén képesek kötődni, ezért detektálásuk sokszor nehézkes. A kötőhelyen lévő aminosavakkal kovalens kölcsönhatást kialakító elektrofil csoport ebben nyújt segítséget, ugyanis a létrejött kovalens komplex tömegspektrometriával egyszerűen azonosítható.

A közelmúltban kutatócsoportunk specifikus kovalens fragmentkönyvtárakat fejlesztett ki. A célpontok validálásához szükséges kötőhelyek felfedezését elsőként az ezek környezetében található ciszteinek kísérleti úton történő azonosításával terveztük. Az azonosításhoz kifejlesztettünk egy azonos vázszerkezettel rendelkező, de különböző elektrofilekkel ellátott fragmentekből álló molekulatár [2]. A könyvtár célpontokon történő szűrése lehetővé teszi a célzott ciszteinek hozzáférhetőségének és reaktivitásának kísérleti vizsgálatát, és segít a szelektív kovalens inhibitorok számára alkalmas elektrofilek azonosításában [3,4].

A célpontokhoz kötődő fragment találatok azonosítása céljából kifejlesztettük az Astex cég által bevezetett ultra kis molekulatömegű ligandumok (MiniFrag) kovalens változatát. Ezekkel a fragmentekkel rejtett és eddig ismeretlen kötőhelyek is sikeresen azonosíthatók. A kovalens MiniFrag könyvtár kis elektrofil heterociklusokból állítottuk össze [5], és olyan kihívást jelentő célpontokon vizsgáltuk, mint az epigenetikában fontos HDAC8, az onkogén KRAS mutánsok, vagy a SARS-Cov-2 fő proteáza [6]. Mivel az elektronszegény heterociklusok aktiválják elektrofil szubsztituensüket, a fragmentek készségesen kötődnek nukleofil aminosavakhoz és ezáltal gyógyszerkutatási programok kiindulópontjául szolgálhatnak.

Hivatkozások:

- [1] Keserű GM. et al. Drug Disc. Today 2020, 25, 983.
- [2] Keserű GM. et al. Chembiochem. 2020 22, 743.
- [3] Keserű GM. et al. Eur J Med Chem. 2020, 207, 112836.
- [4] Keserű GM. et al. Eur J Med Chem. 2022 231, 114163.
- [5] Keserű GM. et al. Medchemcomm. 2018, 10, 263.
- [6] Walsh MA. et al. Nature Comm. 2020, 11, 5047.

## A NANOSZERKEZETŰ ARANY: ELEKTROKATALIZÁTOROK FEJLESZTÉSÉTŐL AZ ORVOSBIOLÓGIAI ALKALMAZÁSOKIG

Csapó Edit

*MTA-SZTE Lendület Nemesfém Nanoszerkezetek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem,  
Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék  
juhaszne@chem.u-szeged.hu; juhaszne.csapo.edit@med.u-szeged.hu*

Az elmúlt évtizedben a nanoszerkezetű anyagok előállítása és szerkezetvizsgálata, számos tudományterületen való alkalmazhatóságuknak köszönhetően, az egyik legdinamikusabban fejlődő kutatási területté vált, melyet az új tudományos publikációk számának évről évre történő rohamos növekedése is igazol. A nanoszerkezetű anyagokon belül különösen a nemesfémek azok, amelyeket egyedi elektromos, mágneses és optikai tulajdonságaiknak köszönhetően az elektronikától a katalízisen át a gyógyászatig számos tématerületen intenzív érdeklődés kísér. Az arany nanorészecskék és nanoklaszterek méretükkel és szerkezetükkel hangolható egyedi optikai (plazmonikus és fluoreszcens) tulajdonsággal rendelkeznek, ami lehetővé teszi optikai bioszenzorokként [1,2] való lehetséges alkalmazásukat, de a tömbfázishoz képest megnövekedett fajlagos felületük következtében katalizátorok alapjait [3,4] is képezhetik. A biokompatibilis nemesfém nanorészecskék és nanoklaszterek nagy kinetikai stabilitást mutatnak fiziológiás közegben, ami lehetővé teszi alkalmazásaikat orvos diagnosztikai és terápiás felhasználásokban. Előadásomban a fenti alkalmazás területeken (katalízis, bioszenzorok fejlesztése, fluoreszcens jelzőanyagok tervezése, diagnosztika stb.) történő lehetőségeit kívánom bemutatni arany nanoszerkezeteknek.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatási munkát a MTA Lendület programja és a FK116323 projekt támogatja.

### Irodalom

- [1] D. Ungor, et al., *Sensors and Actuators, B*, **2019**, 288, 728.
- [2] D. Ungor, et al., *Journal of Molecular Liquids*, **2021**, 338, 116695.
- [3] A. M. Ismail, et al., *ACS Energy Letters*, **2019**, 4, 48.
- [4] A. M. Ismail, et al., *ACS Catalysis*, **2020**, 10, 5681.

## LABORATÓRIUMI ASZTROKÉMIA, AZ EXTRÉM KÖRÜLMÉNYEK KÉMIAJA

**Tarczay György**

*ELTE-MTA Lendület Laboratóriumi Asztrokémia Kutatócsoport, ELTE Kémiai Intézet,  
1117 Budapest, Pázmány P s. 1/a*

A modern csillagászati műszereknek köszönhetően egyre több kémiai információval rendelkezünk a Naprendszer objektumairól, sőt már a Naprendszeren kívüli bolygókról is. A csillagközi térben mára már mintegy 300 molekulát azonosítottak spektroszkópiai módszerekkel. Azonban a földiektől jelentősen eltérő asztrofizikai fizikai környezetek miatt a csillagászati mérési adatok értelmezése sok esetben a csillagász, a kémikus, és a spektroszkópus számára is kihívást jelent. Egyes esetekben már a csillagközi térben megtalálható molekulák előállítása és laboratóriumi szinképeinek felvétele sem egyszerű. Még nagyobb feladat a kémiai reakciók modellezése a csillagközi molekulafelhőket vagy a csillagképződési régiókat jellemző extrém körülmények között. Előadásomban először az ELTE Kémiai Intézetében épült VIZSLA készüléket mutatom be, majd néhány példával illusztrálom, hogy a készülék segítségével hogyan derítettünk fel néhány asztrokémiai szempontból fontos reakciómechanizmust.

## EGYKRISTÁLY RÖNTGENDIFFRAKCIÓS SZERKEZETVIZSGÁLAT DEBRECENBEN

**Bényei Attila**

*Debreceni Egyetem*

Az Magyar Kémikusok Egyesülete közreműködésével alapított Kálmán Alajos Tudományos Díj elnyerése nagy megtiszteltetés számomra. A röntgendiffrakciós módszer alapjainak szemléletes felidézése után az előadásban bemutatom a Debreceni Egyetem Kémiai Intézetében, a Fizikai Kémiai Tanszéken 1995-ben létrehozott egykristály röntgendiffrakciós laboratórium eddigi történetét. Különösen érdekes lesz a budapesti és a debreceni egykristály röntgendiffrakciós készülék fejlesztések összehasonlító áttekintése. Bemutatok olyan szerkezetmeghatározási eseteket, amik a módszer teljesítőképességét is jelzik. Vizsgálataink kiterjednek kis molekulák, fémkomplexek és szerves anyagok szerkezetének igazolására, abszolút konfiguráció meghatározása különböző kiralitás elemek esetén. A gyógyszerhatóanyagok polimorf módosulatainak és kokristályainak előállításával, vizsgálatával és pordiffrakciós adatokból a teljes szerkezet meghatározásával is foglalkozunk. Távlatiakban lehetőség van fehérjék vizsgálatára, ehhez további fejlesztések szükségesek.

## MIKROANALITIKAI FEJLESZTÉSEK A LÉZER INDUKÁLT PLAZMA SPEKTROSKÓPIÁBAN

**Galbács Gábor**

*Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen, Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék,  
6720 Szeged, Dóm tér 7-8.  
galbx@chem.u-szeged.hu*

A lézer indukált plazma spektroszkópia (LIBS) mára az egyik legintenzívebben fejlődő, a laboratóriumban és az iparban is széles körben alkalmazott analitikai atomspektroszkópiai módszerré nőtte ki magát. Ez elsősorban annak köszönhető, hogy a mérés tetszőleges halmazállapotú mintával, akár távról is, gyorsan elvégezhető és a periódusos rendszer minden eleme meghatározható. Nyomanalitikai kimutatási határokkal rendelkeznek és mikrodestruktív, ami azt jelenti, hogy laboratóriumi körülmények között nagy térbeli felbontású mérések vagy szilárd minták elemeloszlás térképezése is elvégezhető vele. A műszer robusztus és kompakt, ezért terepen is jól alkalmazható. Mivel a spektrumok információtartalma kimagaslóan nagy, ezért nem csak kvantitatív, hanem kvalitatív diszkriminációs analitikai feladatok végrehajtására is alkalmas<sup>1,2</sup>.

Tanszéki kutatócsoportunk több, mint két évtizede foglalkozik analitikai célú módszer- és eszközfejlesztésekkel a LIBS spektroszkópia területén, számos innovatív megoldással hozzájárulva a terület fejlődéséhez. A jelen előadás áttekintést ad a LIBS módszer által kínált mikroanalitikai lehetőségekből, a kutatócsoport néhány kiemelt, érdekesebb, de gyakorlati orientáltságú kutatási eredményével illusztrálva azokat.

1. Galbács, G. *Anal. Bioanal. Chem.* **2015**, 407, 7537.

2. Galbács, G. (szerk.) *Laser-Induced Breakdown Spectroscopy in Biological, Forensic and Materials Sciences*; Springer, 2022

## INNOVATÍV KLINIKAI MEGOLDÁSOK TÁMOGATÁSA IONMOBILITÁS-TÖMEGSPEKTROMETRIÁVAL

**Schlosser Gitta<sup>a</sup>, Molnár Adrienn<sup>a,b,c</sup>, Veronika Kralj-Iglic<sup>d</sup>, Balog Júlia<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> MTA-ELTE Lendület Ionmobilitás-tömegspektrometria Kutatócsoport, ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék, 1117, Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A

<sup>b</sup> Hevesy György Kémia Doktori Iskola, ELTE TTK Kémiai Intézet, 1117, Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A

<sup>c</sup> Waters Research Center, 1031 Budapest, Záhony utca 7.

<sup>d</sup> University of Ljubljana, Faculty of Health Sciences, Zdravstvena pot 5, p.p. 397, 1000 Ljubljana, Szlovénia  
gitta.schlosser@tkk.elte.hu

A folyadékkromatográfiával csatolt tandem tömegspektrometria (LC-MS/MS) az egyik legelterjedtebb analitikai módszer biológiai minták lipidomikai vizsgálatára. A lipidek hatékony elemzését nagyban segíti a tömegspektrometriával kombinált ionmobilitás spektrometria (IMS). Az IMS egy gázfázisú elválasztástechnikai, szerkezetkutató módszer, amely a tömegspektrométer ionforrásában keletkező ionokat gázfázisú méretük és alakjuk szerint is képes elválasztani. A molekulák IMS-alapú azonosítására, szerkezetfelfedezésére alkalmas unikális megoldás a ciklikus ionmobilitás elválasztás, amellyel kiemelkedő felbontás érhető el és az ionmobilitás szeparáció tandem tömegspektrometriás mérésekkel változatos kísérleti elrendezésekben kombinálható. A műszer felbontóképessége lehetővé teszi nagyon csekély ütközési hatáskeresztmetszet különbséggel rendelkező molekulák megkülönböztetését, gázfázisú elválasztását is. Kutatómunkánk során ultranagy nyomású folyadékkromatográfiával (UHPLC) csatolt ciklikus ionmobilitás tömegspektrometriát (cIM-MS) alkalmazunk sejtvonalak és extracelluláris vezikulák lipidomikai és proteomikai jellemzésére.

A vizsgált primer sejtvonalak a későbbiekben akár *in vitro* tumormodellként is alkalmazhatóak lennének, ezért részletes vizsgálatuk kiemelten fontos. Korábbi eredményeink alapján tudjuk, hogy a sejtek plazmamembrán lenyomata specifikus a sejtek állapotára és a tumor típusára. A rákos sejtek lipidomikai vizsgálatával tehát célunk a teljes lipidprofil screenelése volt. A rendkívül érzékeny UHPLC-cIM-MS technológia lehetővé teszi a sejtek lipidjeinek részletes vizsgálatát és pontos meghatározását. A mérések során számos plazmamembrán-lipidet azonosítottunk, mint például foszfatidil-etanolaminokat (PE(36:2), PE(O-38:5), PE(O-38:4)) és karakterisztikus foszfatidil-inozitolokat (PI(38:4), PI(38:3)). Emellett a ceramidok (Cer) és foszfatidil-szerinek (PS) pontos azonosítása, valamint a lipidek pontos szerkezetének meghatározása jelenleg is folyamatban van.

A cIM-MS technológiával, illetve ezt más módszerek kiegészítéseként alkalmazva, célunk olyan klinikai megoldások műszeres támogatása, amelyek alkalmasak lehetnek tumorok monitorozására, biomarkerek kimutatására, valamint megfelelően jellemzett plazma-alapú készítmények előállítására.

### Köszönetnyilvánítás

A kutatást támogatta az MTA Lendület Programja (LP2020-9/2021), valamint a Kooperatív Doktori Program. Az SNN 138407 számú projekt az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, az SNN\_21 OTKA pályázati program finanszírozásában valósult meg.

## KEREKASZTAL

## AZ ELEKTROMOBILITÁS KÖRNYEZETI INDIKÁTORAI

**Domokos Endre**

*Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem út 10.  
domokos.endre@uni-pannon.hu*

Vitaindító előadás a „A környezetvédelem aktuális kérdései: akkumulátorgyártás, elektromobilitás” című kerekasztalbeszélgetéshez

A mobilitás, a közlekedés szorosan hozzákötődik a modern kor emberének szabadságképéhez. A globális méretű személyi közlekedés, valamint a fogyasztói attitűdök változásához kapcsolódó teherszállítási igények jelentős terhet jelentenek környezetünknek. A döntéshozók erőteljes, de sokszor éles fordulatot vevő szabályozásokkal próbálják megtalálni az egyensúlyt az állampolgári igények, a vállalati elvárások és a környezet védelme között. Pár éve még az elektromobilitást tartották a megoldásnak, majd jöttek a hidrogén üzemanyagú járművek, ma pedig a bioüzemanyagok a slágertéma.

Előadásomban áttekintem, hogy milyen indikátorok, milyen mutatók mentén lehet kijelenteni egy mobilitási formáról, hogy környezetbarát(abb). Végül javaslatot teszek arra, mi módon lehetne ezeket a mutatókat a valósághoz jobban közelíteni.

**Ágoston Csaba:** „Az elektromobilitás tágabb értelemben vett környezeti hatásai”

**Nagy Sándor Márton:** Kihívások a Li-ion akkumulátor hulladékok feldolgozásában

## SZÓBELI ELŐADÁSOK

## SZÉNHIRÁT-LEKTIN KÖLCSÖNHATÁS VIZSGÁLATA KORSZERŰ NMR ÉS IN SILICO MÓDSZEREKKEL

**Timári István<sup>a</sup>, Farkas László Bence<sup>b</sup>, Balogh Alex Kálmán<sup>b</sup>, Hőgye Fanni<sup>a</sup>, Illyés Tünde Zita<sup>a</sup>, Fehér Krisztina<sup>c</sup>, Helen Blanchard<sup>d</sup>, Szilágyi László<sup>a</sup>, E. Kövér Katalin<sup>b,c</sup>**

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

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

<sup>c</sup>ELKH-DE Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport,

4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>d</sup>Institute for Glycomics, Griffith University, Gold Coast Campus, 4222 Queensland, Australia

timari.istvan@science.unideb.hu

A mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópia az egyik leghatékonyabb eszköz molekulák szerkezetének, dinamikai jellemzőinek és egymással való kölcsönhatásának atomi szintű vizsgálatára. A szénhidrát-lektin fehérje kölcsönhatásoknak fontos szerepe lehet többféle megbetegedésben (pl. tumor kifejlődésben), emiatt megfelelő inhibitorokra nagy szükség mutatkozik. A korábban általunk kifejlesztett, <sup>1</sup>H-<sup>77</sup>Se CPMG-HSQMBC NMR módszer<sup>1</sup> érzékenyen és szelektíven jelzi a ligandumok fehérjéhez kötődését több, versengő ligandum egyidejű jelenléte esetén is, illetve lehetőséget nyújt a ligandumok kötési sorba rendezésére is. A <sup>1</sup>H-<sup>77</sup>Se CPMG-HSQMBC kísérlet fehérjekötési vizsgálatokban való alkalmazása jelentős mértékben felgyorsult, miután a csoportunkban előállítottuk a <sup>77</sup>Se-jelzett szeleno-digalaktozidot. Ugyanis a <sup>77</sup>Se-jelzett szénhidrátszármazékról 2 mM-os koncentráció mellett már néhány perc/kísérlet alatt is értékes, atomi szintű információhoz jutottunk NMR mérésünkből. Továbbá kompetíciós kísérletsorozat formájában, a gyengén kötődő szeléntartalmú ligandum jelenlétében, a módszert kiterjesztettük szelént nem tartalmazó ligandum (pl. tio-digalaktozid, TDG) Galectin-3 (Gal-3) fehérjéhez való kötődésének vizsgálatára is.<sup>2</sup> A csoportunkban előállított szeleno-galaktozidok (Gal-Se-Gal, Gal-Se-Se-Gal) humán Gal-3-mal való kölcsönhatását a fehérje oldaláról is monitoroztuk NMR spektroszkópiával. A <sup>15</sup>N-jelzett Gal-3 fehérjéről <sup>1</sup>H-<sup>15</sup>N HSQC spektrumokat rögzítettünk miközben a szeleno-galaktozid ligandumokat több lépésben adagoltuk a vizsgált oldatokhoz. A fehérje kémiai eltolódásváltozásából információt kaptunk a Gal-3 kötőhelyéről, illetve meghatároztuk a kötődési energiákat. A disszociációs állandó (K<sub>d</sub>) 123 μM-nak adódott a Gal-Se-Gal, és 8500 μM-nak a Gal-Se-Se-Gal esetén. Ezek az értékek nagyságrendileg jó egyezést mutattak az ITC technikával mértekkel. A kötődés helyéről és az atomi szintű kölcsönhatásokról kinyert NMR információkat összevetettük és kiegészítettük a röntgen szerkezetmeghatározásból és molekuladinamikai szimulációkból kapott adatokkal.<sup>3</sup>

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00372/20/7), a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott NKFI PD-135034 és NN-128368 pályázatok, és az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-22-5-DE-424 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának anyagi támogatásával valósult meg.

1. Raics, M., Timári, I., Szilágyi, L., Gabius, H.J., Kövér, K.E.: In: Stowell, S.R., Arthur, C.M., Cummings, R.D. (eds) *Galectins. Methods in Molecular Biology*, 2022, vol 2442. Humana, New York

2. Timári, I.; Balla, S.; Fehér, K.; Kövér, K.E.; Szilágyi, L., *Pharmaceutics* **2022**, 14, 201.

3. Raics, M.; Balogh, Á.K.; Kishor, C.; Timári, I.; Medrano, F.J.; Romero, A.; Go, R.M.; Blanchard, H.; Szilágyi, L.; E. Kövér, K.; Fehér, K., *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, 23, 2494.

## ÁRAMLÁSOS KÉMIA A CIKLODEXTRINEK ÉS A KAPSAICINOIDOK VILÁGÁBAN

**Bálint Erika<sup>a</sup>, Orosz János Máté<sup>a</sup>, Ujj Dóra<sup>a</sup>, Rávai Bettina<sup>a</sup>, Petr Kasal<sup>b</sup>, Benkovics Gábor<sup>a</sup>, Mátravölgyi Béla<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.*

<sup>b</sup> *Department of Organic Chemistry, Charles University, 128 43 Prague 2, Czech Republic  
balint.erika@vbk.bme.hu*

Az áramlásos kémia a szerves kémia térhódításának és a technológia fejlődésének köszönhetően, a 2010-es években jelent meg a gyógyszeriparban, számtalan új lehetőséget teremtve. Áramlásos rendszerekben a vegyületek gyorsabb, biztonságosabb és állandó minőségű előállítása valósítható meg, továbbá a folyamatok könnyen szabályozhatók, méretnövelhetők és automatizálhatók<sup>1</sup>.

A ciklodextrinek (CD-k) ciklikus oligoszacharidok, melyek  $\alpha$ -1,4-glikozidos kötésekkel összekapcsolt glükóz alegységekből álló makrociklusok<sup>2</sup>. A CD-k hidrofób belsővel és hidrofil külsővel rendelkeznek, mely alkalmassá teszi őket hidrofób molekulák komplexálására és oldhatóságuk növelésére. Felhasználásukat tekintve kiemelten fontos szerepet töltenek be az élelmiszer-, a kozmetikai, a gyógyszer- és vegyiparban, valamint a mezőgazdaságban is<sup>3</sup>.

A kapszaicinoidok legismertebb képviselője a kapszaicin, mely az erős paprika csípősségéért felelős komponens. A kapszaicint széles körben alkalmazzák a gyógyszeriparban főként krémekben, izomgyulladás és az azzal járó fájdalom, illetve neuropátiás tünetek enyhítésére, továbbá az élelmiszeriparban csípős szósokban és élelmiszeripari termékek fűszerezésénél.<sup>4</sup> Emellett friss kutatások alapján, a kapszaicinoidok a prosztaták kialakulásának esélyét is jelentősen csökkentheti.<sup>5</sup>

Kutatómunkánk során egyrészt  $\beta$ -CD áramlásos kémiai monoszubsztituálását tűztük ki célul, mely során három lépést, monotozilezést, azidálást és hidrogénezést valósítottunk meg folyamatos reaktorokban<sup>6</sup>. Ezzel a szakaszos eljárásokhoz képest, egy gyorsabb és biztonságosabb eljárást dolgoztunk ki a 6-monoamino-6-monodeoxi- $\beta$ -CD előállítására.

Másrészt célunk volt a kapszaicinoidok áramlásos kémiai szintézise benzaldehid-származékokból kiindulva, oximképzésen, hidrogénezésen, végül *N*-acilezésen keresztül. Az előállított vegyületek vízoldhatóságának és biohasznosulásának növelése céljából, tanulmányoztuk a kapszaicinoidok fázisoldhatóságát és komplexálását különféle CD-kel. Végül együttműködés keretében vizsgáltuk az előállított kapszaicinoidok és CD komplexek biológiai aktivitását.

1. Baumann, M.; Moody, T. S.; Smyth, M.; Wharry, S. *Org. Process Res. Dev.* **2020**, *24*, 1802.

2. Szejtli, J. *Chem. Rev.* **1998**, *98*, 1743.

3. Hedges, A. R. *Chem. Rev.* **1998**, *98*, 2035.

4. Basith, S.; Cui, M.; Hong, S.; Choi, S., *Molecules*, **2016**, *21*, 10.

5. Ramos-Torres, Á.; Bort, A.; Morell, C.; Rodríguez-Henche, N.; Díaz-Laviada, I., *Oncotarget*, **2016**, *7*, 1570.

6. Orosz, J. M.; Ujj, D.; Kasal, P.; Benkovics, G.; Bálint, E. *Beilstein J. Org. Chem.* **2023**, *19*, 294.

A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal FK123961 pályázat és a 2020-1.1.2-PIACI-KFI-2021-00234 Piaci KFI pályázat támogatásával készült.

## EXO-GLIKÁL SZÁRMAZÉKOK TIOL-ÉN ÉS [2+2] TÍPUSÚ CIKLOADDÍCIÓS REAKCIÓINAK VIZSGÁLATA

**József János<sup>a</sup>, Vágvölgyiné Tóth Marietta,<sup>a</sup> Illyés Tünde Zita,<sup>a</sup> E. Kövér Katalin,<sup>†b</sup>  
Somsák László<sup>a</sup>, Juhász László,<sup>a</sup>**

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

<sup>b</sup>Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.  
jozsef.janos@science.unideb.hu

A szénhidrátok és konjugátumaik szinte valamennyi élő sejtben és sejt felszínén megtalálhatók, ezért fontos résztvevői számos fiziológiás és patológias folyamatnak. Tekintettel a természetes glikozidok kis mennyiségű előfordulására, valamint a bennük található *O*-glikozidos kötés csekély kémiai, enzimatis, valamint metabolikus stabilitására a biológiai vizsgálatokhoz ezeknek a származékoknak a szerkezetét és/vagy biológiai funkcióját utánozó, (fél)szintetikusan előállított vegyületeket, az ún. glikomimetikumokat használják, melyekben az egyéb szerkezeti módosítások mellett, az *O*-atomot leggyakrabban *C*-, *S*-, vagy *N*-atommal helyettesítik.<sup>1,2</sup>

Kutatómunkánk ilyen kedvező sajátságokkal bíró, új típusú szénhidrátmimetikumok szelektív szintézismódszereinek kidolgozására irányult, reaktív és változatos módon funkcionálizálható kettős kötéssel rendelkező *exo*-glikál származékokból kiindulva.

Munkánk során vizsgáltuk 2-dezoxi, valamint D-manno konfigurációjú *exo*-glikál származékok fényiniciált, tiol-én típusú addíciós reakcióját. A korábbi eredmények alapján a gyökös mechanizmusú tioladdíciós reakciók nagyfokú regio- és sztereoselektivitása lehetőséget adhat a nehezen kialakítható  $\beta$ -anomer konfiguráció kialakításra ezen származékok esetében is.<sup>3-6</sup>

Tanulmányoztuk továbbá per-*O*-acilezett *exo*-glikálok [2+2]-típusú cikloaddíciós reakcióját diklór-keténnel és klórszulfonil-izocianáttal, ezekben a reakciókban spiro-ciklobutanon, valamint spiro- $\beta$ -laktám szerkezeti egységet tartalmazó szénhidrátszármazékokat kaphatunk. Az így nyert vegyületek szintetikus szempontból igen értékes intermedierek lehetnek, hiszen gyűrűnyitásuk nukleofilekkel új típusú *C*-glikozil-vegyületek, valamint aminosav konjugátumok szintézisét teheti lehetővé.

1. Hevey, R. *Pharmaceuticals* **2019**, 12 (2), 55.

2. Ernst, B.; Magnani, J. L. *Nat. Rev. Drug Discov.* **2009**, 8 (8), 661.

3. Dondoni A.; Marra A. *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, 41, 573.

4. Gervay J.; Flaherty T. M.; Holmes D. *Tetrahedron*, **1997**, 53, 16355.

5. Lázár L.; Csávás M.; Hadházi Á.; Herczeg M.; Tóth M.; Somsák L.; Barna T.; Herczegh P.; Borbás A. *Org. & Biomol. Chem.* **2013**, 11, 5339.

6. József J.; Juhász L.; Illyés T. Z.; Csávás M.; Borbás A.; Somsák L. *Carbohydr. Res.* **2015**, 413, 63.

7. Umbreen, S.; Linker, T. *Chem. Eur. J.* **2015**, 21 (20), 7340.

8. Chmielewski, M.; Kaluza, Z.; Furman, B.; *Chem. Commun.* **1996**, 2689.

## RADIOJELÖLT VEGYÜLETEK FEJLESZTÉSE ÉS FELHASZNÁLÁSUK PET KÉPALKOTÁS CÉLJÁBÓL

**Dénes Noémi, Gyuricza Barbara, Képes Zita, Hajdu István, Jószai István, Trencsényi György, Kertész István**

*Debreceni Egyetem, ÁOK, Orvosi Képző Intézet, Nukleáris Medicina Tanszék,  
4032 Debrecen, Nagyerdei krt. 98.  
denes.noemi@med.unideb.hu*

A daganatos megbetegedések okozta halálos esetek tekintetében sajnos Magyarország a vezető helyet foglalja el. A halálozás egy része elkerülhető lenne a korai és hatékony diagnosztikai módszerek alkalmazásával, valamint a specifikus kölcsönhatásokon alapuló, személyre szabott orvoslás fokozott igénybevételével. Ezen feladat első lépése az, hogy olyan speciális interakció alapján dúsuló PET radiofarmakonok fejlesztése folyjon, amely kiszolgálja a PET diagnosztika ilyen célú igényeit. A PET fejlődése az elmúlt két évtizedben lehetővé tette a radiofarmakonok egyre szélesebb körű alkalmazását mind a rutin klinikai gyakorlatban, mind kutatási célú projektekben<sup>1</sup>. A gyógyszergyárak is egyre inkább felismerik annak jelentőségét, hogy fejlesztéseik hatékonyságát minél hamarabb, preklinikai fázisban, élő rendszerben méressék meg. Éppen ezért, a peptidek és a biológiailag aktív vegyületek minél hatékonyabb alkalmazásának a nukleáris medicina gyakorlatában komoly szerep juthat a közeljövőben. Különösen fontos lehet olyan módszerek kidolgozása, amelyek függetlenek pl. a nagy költségigényű ciklotronok közelségétől.

A <sup>68</sup>Ga egy generátor izotóp 68 perces felezési idővel. Különös jelentősége abban rejlik, hogy hosszútávon megoldást jelenthet a biomolekulák jelölésére ciklotronnal nem rendelkező centrumok számára is. A generátor rugalmas izotópellátást biztosít, hiszen 4 óránként az elméleti maximális aktivitás 90%-át újratermeli, és az anyaelem – <sup>68</sup>Ge – hosszú felezési idejének köszönhetően (271 nap) a generátor 1-2 évig is használható<sup>2</sup>. Az utóbbi években sokat fejlődött a gallium-alkalmazásához szükséges koordinációs kémiai háttér is, a nagy stabilitású komplexek jól használhatóak az élő szervezetben. Az izotóp fizikai felezési ideje ideális a peptidek és kis molekulatömegű vegyületek farmakokinetikájához. A jelölt, szelektív analógok általában gyors dúsulást mutatnak a célzott szövetekben, míg rövid idő alatt kiürülnek a véráramból<sup>3</sup>.

Célkitűzésünk tehát olyan, sikeres receptor-szelektív radioligandumok elkészítése, amelyek jól hasznosíthatóak biológiai folyamatok monitorozására.

1. Wadsak W, Mitterhauser M. Basics and principles of radiopharmaceuticals for PET/CT. Eur J Radiol. 2010 Mar;73(3):461-9. doi: 10.1016/j.ejrad.2009.12.022. Epub 2010 Feb 24. PMID: 20181453.

2. Velikyan I. <sup>68</sup>Ga-Based radiopharmaceuticals: production and application relationship. Molecules. 2015 Jul 16;20(7):12913-43. doi: 10.3390/molecules200712913. PMID: 26193247; PMCID: PMC6332429.

3. Ramogida CF, Orvig C. Tumour targeting with radiometals for diagnosis and therapy. Chem Commun (Camb). 2013 May 25;49(42):4720-39. doi: 10.1039/c3cc41554f. PMID: 23599005.

## NANOMŰANYAGOK ÉS BIOMOLEKULÁRIS RENDSZEREK KÖLCSÖNHATÁSÁNAK VIZSGÁLATA

**Hollóczki Oldamur, Kovács Tibor**

*Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.  
holloczki.oldamur@science.unideb.hu*

A környezetünkben emberi tevékenység következtében jelenlévő műanyagok fizikai, kémiai és biológiai folyamatokban mikro- és nanoműanyag részecskékké aprózódnak. Ezen anyagok az ételmiszer- illetve folyadékfogyasztással a szervezetünkbe kerülnek, csakúgy, mint az ökoszisztéma további élőlényeiébe. Arra azonban egyelőre csak elszórtan áll információ rendelkezésre, hogy e részecskék milyen hatással lehetnek az emberi szervezetre illetve a környezetünkre. E probléma áthidalását elősegítendő, számításon alapuló kémiai és molekulamodelllezési módszerekkel vizsgáljuk kisméretű műanyag részecskék és biomolekuláris rendszerek kölcsönhatását, amely a területen folyó kísérletek tervezésében és értelmezésében nyújthat jelentős segítséget.

Egy holland kutatócsoportnak meglepő módon emberi vérmintákból sikerült mikroműanyagok jelenlétét kimutatni.<sup>1</sup> Felmerül tehát a kérdés, hogy vajon át tudnak-e jutni ezek az anyagok a vér-agy gáton. Molekuladinamikai szimulációk segítségével megmutattuk, hogy polisztirol nanorészecskék egy vér-agy gát modell lipid kettősrétegbe nagyon exoterm folyamatban, tehát irreverzibilisen abszorbálódnak. A fázisátmenet nagy negatív reakcióhője tehát kérdésessé teszi, hogy az agyi oldalon a részecske ki tud-e lépni. A szervezetben azonban a nanorészecskék felületét – beleértve a nanoműanyagokat is – általában egy úgynevezett korona fedi, mely pl. lipidekből vagy fehérjékből állhat. Számításainkkal kimutattuk, hogy a korona az abszorpció energiáját alapvetően befolyásolja, és a folyamat bizonyos esetekben akár erősen endotermmé is válhat. Ez arra enged következtetni, hogy a korona megfelelő összetétele mellett a nanoműanyagok nem csak bejuthathatnak a vér-agy gátba, hanem át is kerülhetnek rajta. Ezt együttműködő partnereinkkel egérkísérletekben is sikeresen igazoltuk, melyek során az egér agyszövetében a műanyag részecskéket tartalmazó táplálék elfogyasztása után mindössze két órával megjelentek ezen anyagok.<sup>2</sup>

A fehérjékkel való kölcsönhatás vizsgálatához egy 12 alanin egységet tartalmazó  $\alpha$ -hélix modellpeptidet választottunk. Molekuladinamikai szimulációink a különböző műanyagok hatása között érdekes különbségeket mutattak.<sup>3,4</sup> Míg egy polietilén részecske felületén a hélix a többi izomerhez képest stabilizálódott, egy nylon-6,6 felületen épp a fordított hatás tapasztalható, és egy  $\beta$ -hurokhoz hasonló szerkezet spontán kialakulását figyeltük meg. Fehérjék másodlagos szerkezetének ilyen jellegű spontán változásai nem csak denaturálhatják a szervezetben e biomolekulákat, hanem súlyos betegségeket, többek között neurodegeneratív kórokat, azaz agyi elváltozásokat is okozhatnak, ami jól mutatja az e területen a kutatások folytatásának szükségességét.

1. Leslie, H.A.; van Velzen, M.J.M.; Brandsma, S.H.; Vethaak, A.D.; Garcia-Vallejo, J.J.; Lamoree, M.H. *Environ. Int.* **2022**, *163*, 107199.
2. Kopatz, V.; Wen, K.; Kovács, T.; Keimowitz, A. S.; Pichler, V.; Widder, J.; Vethaak, D. A. Hollóczki, O.; Kenner, L. *közlésre benyújtva*.
3. Hollóczki, O.; Gehrke, S. *Sci Rep* **2019**, *9*, 16013.
4. Hollóczki, O. *Int. J. Quantum Chem.* **2021**, *121*, e26372.

**SUPERSMARTLAB AZ ELTÉ-N:  
XXI. SZÁZADI LABORKÖRNYEZET, TECHNOLÓGIA,  
OKTATÁSI MÓDSZEREK ÉS HALLGATÓI KOMPETENCIÁK**

**Tarczay György**

*ELTE Kémiai Intézet, 1117 Budapest, Pázmány P s. 1/a*

2024-től az alap- és mesterképzésben részt vevő hallgatóink egy mesterséges intelligenciával és modern okostechnológiákkal technológiákkal felszerelt, a kor kihívásainak minden tekintetben megfelelő SuperSmartLab-re keresztelt oktató laboratóriumban kezdhetik meg tanulmányaikat. Az ELTE SuperSmartLab-jának indulásával jelentős változást tervezünk a kémia gyakorlati oktatásában. Ez nemcsak a gyakorlati feladatok modernizálását és átstrukturálását jelenti, hanem új, a Z és alfa generációk hallgatóinak képességeire és érdeklődésére jobban épülő, oktatásmódszertani eszközök bevezetését is magában foglalja. Céljaink szerint a hallgatói kompetenciák között előtérbe kerül a komplexebb gondolkodás, a kreativitás, és az innovációs készség. Nem titkolt szándékunk, hogy a modern technológia segítségével a fiatalok figyelmét jobban a természettudományok és a kémia felé irányítsuk. Reményeink szerint a cégek és az ipari szereplők is felismerik a SuperSmartLab elgondolás mögött rejlő lehetőséget, és csatlakoznak hozzánk, hogy együtt, együttműködésben formáljuk a jövő vegyészeinek és kémiatanárainak ismereteit és készségeit.

## AZ AZIDO SZENNYEZŐK SZEREPE AZ IRBESARTAN GYÁRTÁSI TECHOLÓGIÁJÁNK MÓDOSÍTÁSÁBAN

**Morvai Miklós, Sőregi Nagy Dávid, Szabó András, Heim Krisztián**

*EUROAPI Hungary Kft, 1045 Budapest, Tó utca 1-5.  
miklos.morvai@euroapi.com*

Az azido szerkezeti elemet tartalmazó szerves szennyezők nagy része potenciálisan genotoxikus hatással rendelkeznek ezért a mennyiségük a gyógyszerhatóanyagokban szigorúan limitált. Egy hatósági kérdés eredményeképpen vizsgálnunk kellett az általunk gyártott Irbesartan gyógyszerhatóanyagban két lehetséges azido szennyező mennyiségét. Ennek eredményeképpen kiderült, hogy módosítanunk kell az Irbesartan gyártási technológiáját annak érdekében, hogy a korábbinál hatékonyabban tudjuk biztosítani az egyik problémás genotoxikus szennyező alacsony mennyiségét.

Az előadás összefoglalja a genotoxikus szennyezőkkel kapcsolatos jelenlegi hatósági elvárásokat, a potenciális szennyezők feltérképezésének nehézségeit és megoldási lehetőségeit. Az Irbesartan gyártás példáján bemutatásra kerül az azido szennyezők keletkezésének vizsgálata; a szennyezők mennyiségi meghatározásához kidolgozott analitikai módszer kifejlesztése; valamint a technológiai módosítások hatása a szennyezőmennyiségére. A fejlesztési munka eredményeképpen a gyártási paraméterek módosításával sikerült a kérdéses azido szennyező mennyiségét biztonsággal a megfelelő szintre csökkenteni.

## CONTROL TOWER – AVAGY A MESTERSÉGES INTELLIGENCIA A GYÓGYSZERIPARI TERMELÉSBEN

**Buzder-Lantos Péter**

*EUROAPI Hungary Kft., 1045 Budapest, Tó utca -6.  
Peter.buzder-lantos@euroapi.com*

Az Euroapi cégcsoporton belül a budapesti telephelyen elsőként vezettünk be egy komplex, a termelés hatékonyságát elősegítő digitális eszközt, amely a mesterséges intelligencia segítségével öntanuló, önfejlesztő tulajdonságokkal is rendelkezik.

Az eszköz segítségével a heti bontású termelési tervből egy részletes, gyártási részfolyamatokra lebontott tervet kapunk, eszközkiosztással és emberi erőforrás allokációval.

Ezek után a terv úgynevezett TAG-ek segítségével automatikusan lekövetésre is kerül vizualizálva ütemezés megvalósulás és csúszások arányát, tényét.

Automatikus KPI megjelenítés és adatelemzés segítségével pedig folyamatos fejlesztést tudunk végrehajtani a folyamatainkon.

Sok éve bevezetett és számos kémiai fejlesztési cikluson átesett termékünk esetén is további hatékonyságnövelő intézkedést tudunk foganatosítani és újabb kémiai fejlesztési lehetőséget, ötletet azonosítottunk.

Előadásunkban kitérünk arra is, vajon kell-e félni a mesterséges intelligencia térnyerése kapcsán.

## ADATALAPÚ FEJLESZTÉS – STATISZTIKA A VEGYIPAR 4.0-BAN

Hudáky Péter

*EUROAPI Hungary Kft, 1045 Budapest, Tó utca 1-5.  
peter.hudaky@euroapi.com*

A forradalmak közös jellemzője, hogy valami egészen új jelenség robbanásszerű fejlődést tesz lehetővé. Amikor az elemzést mesterséges intelligencia végzi, az adattenger feldolgozása alapján szoftverek ontják a következtetéseket, amiket aztán a vezérlést végző folyamatparaméterekké fordítanak a hatékonyság növelése érdekében, akkor megváltozik a vegyiparban végzendő munka súlypontja és új távlatok jelennek meg. Alkalmazásuk a fenntartható kémiai gyártás alappillére.

Az Ipar 4.0 fő üzenete az eszközök együttműködése. Gőzgép, a futószalag és az automatizálás után a kiber-fizikai rendszerek adják a fejlődés motorját. Az előttünk álló feladat nem kevesebb mint ezt a motort irányítani.

A negyedik (vegy)ipari forradalom egyik eleme az adatalapú fejlesztés, a rendelkezésre álló gyártási nyersadatok olyan rendezése és rendszerezése, ami megmutatja a gyártás optimalizálásának irányát. Egy hőmérsékletváltozási ütem, egy várakozási idő, egy nyomásérték szórása hatással lehet egy vagy néhány, több gyártási lépéssel későbbi folyamat hatékonyságára. Egy reakció vagy folyamat vezérlése az élő időben rendelkezésre álló és rendszerezett statisztikai adatok alapján tehát függhet akár az adott gyártási tétel előéletétől.

A statisztikai folyamat vezérlés (SPC) előszobája a statisztikai folyamat elemzés (SPA). Az Euroapi Hungary Kft.-nél bevezetett SPA módszer négy típusú célkitűzést támogat: az energiahatékonyság, minőség, kitermelés és időigény fejlesztését. A legyártott tételek statisztikai vizsgálata során keresztkorrelációkat keresünk a választott eredményességi paraméter és a folyamatparamétereink között, ezek alapján szabálykészletet fogalmazunk meg és alkalmazásukkal növeljük az eredményességi mutatót.

## BERAPROST NÁTRIUM ABSZOLÚT KONFIGURÁCIÓJÁNAK ALÁTÁMASZTÁSA KIRÁLIS ANALITIKAI MÓDSZEREKKEL

**Rádai Zita, Meleg Ildikó, Póti Judit, Takács László, Hortobágyi Irén**

EUROAPI Hungary Kft., 1045 Budapest, Tó utca 1-5.

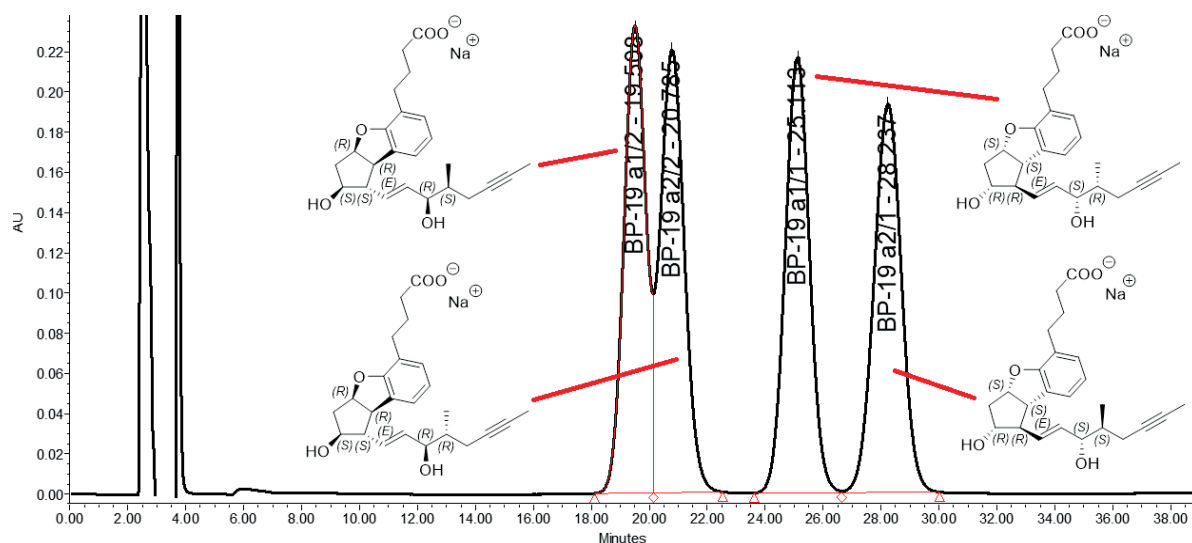
Zita.Radai@euroapi.com

A Beraprost nátrium az EUROAPI Hungary Kft. egyik fő prosztaglandin hatóanyaga, melyet négy sztereoizomer (két enantiomerpár) keverékeként értékesítünk. A gyógyszerhatóságok részéről felmerült a kérdés, hogy támasszuk alá a Beraprost Na abszolút konfigurációját. A Beraprost Na hat kiralitáscentrumot és egy kettőskötést tartalmaz, tehát sztereoizomereinek száma elméletileg  $2^7 = 128$ . Az összes lehetséges sztereoizomer szennyező standard szintézise nem lehetett reális cél, főleg nem a rendelkezésünkre álló szűkös határidőt figyelembe véve.

A gyógyszerhatóságnak adott válaszukban először megmutattuk, hogy a lehetséges sztereoizomerek jelentős részének keletkezését már a gyártás során kiküszöböljük sztereoszelektív reakciók alkalmazásával. A furán gyűrűben található kiralitáscentrumok konfigurációja vagy *(R,R)* vagy pedig *(S,S)*, mivel a furán gyűrű egy sztereoszelektív  $S_N2$  reakcióban keletkezik. A furán gyűrűben található két kiralitáscentrum térállása meghatározza a ciklopentán gyűrű két kiralitáscentrumának térállását, mivel ezek regio- és sztereoszelektív Prins-reakcióban<sup>1</sup> alakulnak ki. A triciklusos váz már négy kiralitáscentrumot tartalmaz, viszont a szelektív reakciók miatt ez csak két sztereoizomert (egy enantiomerpárt) jelent.

Az ötödik kiralitáscentrum az alsó lánc  $C^*CH_3$  centruma. Az alsó láncot racemátként reagáltatjuk a triciklusos vázzal, így megduplázódik a sztereoizomerek száma, itt keletkezik a négy sztereoizomer. Végül a hatodik kiralitáscentrum egy sztereoszelektív  $C=O \rightarrow OH$  redukcióban alakul ki, ezen a ponton már nem nő az izomerek száma.

A sztereoizomerek számának bizonyítására három királis HPLC módszert fejlesztettünk. Egy-egy módszerrel bizonyítottuk azt, hogy a Beraprost Na két fő szerkezeti eleme – a triciklusos váz és az alsó lánc – racém. A harmadik királis HPLC módszer alkalmas a négy Beraprost Na sztereoizomer szelektív mérésére és az izomerarány meghatározására.



1. Tömösközi, I.; Gruber, L.; Kovács, G.; Székely, I.; Simonidesz, V. *Tetrahedron Lett.* **1976**, *17*, 4639.

## ÉLELMI FEHÉRJÉK TÁPÉRTÉKBECSLÉSE EMÉSZTÉSSZIMULÁCIÓVAL

**Tormási Judit, Berki Mária, Lengyelne Kónya Éva, Tömösköziné Farkas Rita,  
Abrankó László**

*Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet,  
Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék, 1118 Villányi út 35-43, Budapest, Magyarország  
abranko.laszlo.peter@uni-mate.hu*

A napi fehérjeszükségletnek táplálkozási szempontból alap esetben az a mennyiség tekinthető, amely képes pótolni a (széklettel, vizelettel, hajhullással stb.) elszorított természetes napi veszteségeket. E mennyiség függ többek között az adott fehérje aminosav összetételétől, a fehérje emészthetőségétől, valamint az emésztést befolyásoló és a fehérjével együtt elfogyasztott ún. antinutritív összetevőktől. A hatályos EU ételjelölési szabályok értelmében, egy étel fehérjetartalmára vonatkozó mennyiségi állítások (pl.: „fehérjében gazdag”, vagy „a napi beviteli referenciaérték X%-át tartalmazza”) alapja az átlagos, egészséges felnőttekre vonatkozó, egységes referenciaértéknek tekintett 50 g/nap fehérjemennyiség. Ez a megközelítés átlagos, vegyes étrenddel kalkulál és nem képes kezelni, hogy a különböző fehérjeforrások tápértéke nagymértékben különbözhet. A napjainkban egyre markánsabban megjelenő növényi fehérjék, valamint az ezeket domináns mértékben alkalmazó diéták térhódítása szükségessé tennék, hogy a szabályozási rendszer valamilyen módon megjelenítse, vagy figyelembe vegye az étel fehérjék olykor jelentősen eltérő tápértékét. A tápérték jellemzésére több nemzetközileg elfogadott mutató is alkalmazható, melyek becslése klasszikus módon *in vivo* módon történik.

Munkánk célja az volt, hogy olyan gyors és gazdaságos emésztésszimuláción és ehhez harmonizált analitikai módszereket alakítsunk ki, mely alkalmas lehet étel fehérjék és ételek két elismert fehérje tápértékmutatójának, a PDCAAS (Fehérje emészthetőséggel korrigált aminosavérték/Protein Digestibility Corrected Amino Acid Score) és a DIAAS mutatók (Emészthető nélkülözhetetlen aminosavérték/Digestible Indispensible Amino Acid Score) *in vitro* becslésére.

A munka során az Infogest statikus emésztési modellt alkalmaztuk és az aminosavösszetételt mikrohullámú roncsolást követő származékképzés (AQC) után UHPLC-UV módszerrel vizsgáltuk. Öt különféle kereskedelmi forgalomban kapható húskészítményt (felvágott, szalámi, sonka, kolbász, virsli), valamint egy tejfehérje koncentrátumot (Milk Protein Concentrate, MPC), egy növényi húsimitátumot és egy további ételt (főtt tészta) vizsgáltunk. Eredményeink a tejfehérje koncentrátumra és egyes húskészítményekre korlátozottan rendelkezésre álló irodalmi adatokkal jó egyezést mutattak. A baromfirudacska kivételével, a vizsgált húskészítmények esetén, a 3 évesnél idősebb gyerekekre, felnőttekre és idősekre egységesen alkalmazandó aminosavigény mintázat alapján számolt *in vitro* DIAAS érték meghaladta a 120-as értéket, míg MPC esetén a 140-et és a limitáló aminosav a húskészítményeknél a Leu, MPC esetén a kéntartalmú aminosavak voltak. Baromfi rudacska és a vegán falafel *in vitro* DIAAS mutatója jelentősen elmaradt a fentiekétől (rendre 61 és 34 volt), a limitáló aminosav pedig ezeknél a Trp.

*Köszönetet az OTKA K135294 pályázat nyújtotta finanszírozásért.*

## ROVAROK AMINOSAV- ÉS KITIN-TARTALOM VIZSGÁLATA

**Tömösköziné Farkas Rita, Berki Mária, Lengyelné Kónya Éva,  
Adányiné Kisbocskói Nóra, Horváthné Szanics Enikő**

*MATE, Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai  
Intézet, Élelmiszertudományi Kutatócsoport, 1118, Budapest Villányi út 29-43.  
farkas.rita@uni-mate.hu*

Az Európai Unió az elmúlt években engedélyezte néhány rovar mind humán élelmiszer, mind takarmány célú felhasználását. A lisztbogár lárvája, a házitücsök és a keleti vándorsáska részben zsírtalanított porított formában élelmiszer-alapanyagként és feldolgozott formában is forgalmazható az Európai Unió tagállamaiban. A FAO álláspontja szerint a rovarok értékes, fenntartható fehérjeforrások, hiszen nagy mennyiségben tartalmaznak fehérjét, aminosavakat, ásványi anyagokat és vitaminokat, kisebb arányban rostokat és zsírokat. A rovarfehérjék felhasználásának azonban a takarmány-előállításban van jelentősebb szerepe, ahol kiemelkedő szempont a megfelelő aminosav összetétel elérése és ehhez fontos feladat a rovarok aminosav-összetételének vizsgálata. A takarmányozási célra szánt rovarok kitin tartalmának vizsgálata két szempontból is lényeges: egyrészt a kitin a nyers fehérje tartalom „túlbecsülését” eredményezheti, másrészt csökkentheti a fehérjék, valamint az aminosavak emészthetőségét.

Kutatásaink első felében adaptáltunk és optimaltunk egy hagyományos a kitin N-acetil-glükózaminra történő hidrolízisén alapuló indirekt meghatározást, ahol mikrohullámú roncsolást követően, FMOC-származékképzés után HPLC-FLD módszerrel mértük a monomer mennyiségét több rovarkészítményben. A rovarok aminosavösszetételét mikrohullámú roncsolást követő származékképzés (AQC) után UPLC-UV módszerrel vizsgáltuk.

Az EU által engedélyezett 7 rovar közül a 3 leggyakrabban alkalmazott fekete katonalégy (*Hermetia illucens*), lisztbogár (*Tenebrio molitor*) és kék dongólégy (*Calliphora vicina*) valamint a selyemhernyó lárva (*Bombyx mori*) aminosav összetételét hasonlítottuk össze. A vizsgált rovarminták fehérjetartalma 40-50% közötti tartományban mozgott. A takarmányozás szempontjából fontos esszenciális aminosavak tették ki az összes aminosav 40-60%-át. A kitintartalom mérésével nyomon tudtuk követni a lárvák fejlődési szakaszait, ezáltal meghatározható az a pont, ahol a fehérje - kitin arány optimális. A módszerrel kiszűrhetők a takarmányozásra már nem alkalmas, magas kitintartalmú készítmények.

*A kutatást a TKP2020-NKA-24, és a 2020-1.1.2-PIACI-KFI-2021-00300-projektek keretében végeztük.*

## ÚJ TAKARMÁNYÖSSZETEVŐK HATÁSA AFRIKAI HARCSA IVADÉKOK NÖVEKEDÉSÉRE

**Lengyel-Kónya Éva<sup>1</sup>, Gebremichael Askale<sup>2</sup>, Kucska Balázs<sup>3</sup>, Ardó László<sup>4</sup>, Biró Janka<sup>4</sup>,  
Berki Mária<sup>1</sup>, Tömösközi-Farkas Rita<sup>1</sup>, Egessa Robert<sup>4</sup>, Müller Tamás<sup>5</sup>, Gyalog Gergő<sup>4</sup>,  
Jakab-Sándor Zsuzsanna<sup>4</sup>**

<sup>1</sup> *Élelmiszertudományi Kutatócsoport, Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, BC,  
1118 Budapest, Villányi út 29-43.*

<sup>2</sup> *Alkalmazott Halbiológiai Tanszék, Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, KC,  
7400 Kaposvár Guba S. u. 40.*

<sup>3</sup> *Természetesvízi Halökológiai Tanszék, Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem KC,  
7400 Kaposvár Guba S. u. 40.*

<sup>4</sup> *Halászati Kutató Központ, Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem,  
5540 Szarvas Anna liget. u. 35.*

<sup>5</sup> *Természetesvízi Halökológiai Tanszék, Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, SzIC,  
2100 Gödöllő Páter K. u. 1.*

*lengyelne.konya.eva@uni-mate.hu*

Az afrikai harcsa tenyésztésében alkalmazott takarmányok fő fehérjeforrása a halliszt, mely bár magas tápértékkel rendelkezik, magas előállítási költsége és a kínálati hiány miatt limitáló tényező. Hathetes etetési kísérlet keretében vizsgáltuk a haltakarmányban a halliszt hányad teljes (100%) vagy részleges (50%) helyettesítésének hatását az afrikai harcsa ivadékok növekedésére és egészségére. A haltakarmányokban új összetevőként fekete katonalégy lárva (B), sárga lisztgukac (M), illetve ezek 1:1 arányú keverékét (BM) alkalmaztuk. A kísérlet során 420 db 200±0,5 g kezdeti súlyú afrikai harcsát hét csoportba osztottunk (kontroll, B50, B100, M50, M100, BM50, BM100), majd az alkalmazott takarmánykiegészítők hatását a növekedési mutatók, takarmányhasznosulási paraméterek, vérplazma biokémiai értékeinek, halmájak zsírsav összetételének alapján értékeltük.

A fekete katonalégy lárva részleges vagy teljes alkalmazásával nem tapasztaltunk szignifikáns hatást ( $p>0,05$ ) a halak növekedésében, illetve a takarmányhasznosulásban. A halliszt sárga lisztgukaccal történő részleges vagy teljes kiváltása viszont szignifikáns negatív eltérést eredményezett a kontroll csoporthoz képest a végső testsúly, takarmányhasznosulási, fehérjehasznosulási arányban és fehérjeelőállítási értékben. A vérplazma biokémiai paraméterei közül az összkoleszterin szint szignifikánsan csökkent a kontroll étrendhez képest. Míg a halmájak lipidtartalma nem változott, a zsírsav profiljukban a hosszú szénláncú többszörösen telítetlen zsírsavak tekintetében szintén csökkenést tapasztaltunk. A kísérlet eredményeként elmondható, hogy a fekete katonalégy lárva jól alkalmazható takarmánykiegészítésre, a halliszt kiváltására, mivel nem befolyásolta kedvezőtlenül a kísérleti állatok növekedési teljesítményét és anyagcsere válaszát, ellenben a sárga lisztgukac nem alkalmas takarmánykiegészítésre a halak növekedésére, egészségére és a takarmányhasznosulásra gyakorolt negatív hatása miatt.

*A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal TKP2020-NKA-24 – Fehérjetakarmányprogram a magyar mezőgazdaság minőségi és mennyiségi fejlődéséhez és a társadalom jólétének erősítésére, az Innovációs és Technológiai Minisztérium KEHOP-3.2.1-15-2021-00037 – A körforgásos gazdaságra történő átállás előkészítési feladatai a mezőgazdasági és zöldhulladékok esetében és a Stipendium Hungaricum ösztöndíj program keretében valósult meg.*

## TOXIC METALS AND METALLOIDS IN SEAFOOD

Joseph Sneddon<sup>a</sup>, Chad A. Thibodeaux<sup>b</sup>, Viktor G. Mihucz<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Department of Chemistry and Physics, McNeese State University,  
Lake Charles, Louisiana 70609, USA

<sup>b</sup> School of Biological and Physical Sciences, Northeastern University,  
Natchitoches, Louisiana 71497, USA

<sup>c</sup> Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemistry,  
ELTE – Eötvös Loránd University, 1117 Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A, Hungary  
viktor.mihucz@ttk.elte.hu

The surface of the Earth is covered by approximately 70% of water and seafood is a major source of protein for the population. Seafood also has a large economic factor for many communities around the world. The seas have been found to be a dumping ground for many potential pollutants including metal ions, especially the coastal zones due to their industrialization, urbanization and overexploitation of resources. This deteriorated water quality, especially in the lack of adequate wastewater management plans, raises questions about seafood quality. The metal(oid) ions in the seas will be taken up and accumulated by the marine organisms and can enter the food chain potentially causing serious health concerns. Increased human exposure risk include consumers of commercially harvested shellfish, recreational and subsistence fishers, subsistence shellfish consumers as well as children. However, the extent of accumulation in fish is depending on several factors including the fish species, tissue/organ type, age, sex, swimming pattern, reproductive cycle, seafloor sediments, nature of chemical element, etc.<sup>1-4</sup>. Several countries have enacted laws and warnings regarding the minimum concentration of many metal(oid)s in seafood, attracting interest in determining trace elements in various seafood.

Quantitative determination of trace elements in seafood is important due to their toxicity in addition to their non-biodegradable properties. Even essential elements like Cu, Fe and Zn show toxic effects in humans in the case of their excessive intake<sup>5</sup>. Mercury, Cd and Pb are associated to many adverse effects on health even at low concentration levels<sup>6</sup>. About 90% of As in edible seafood is present as arsenobetaine, regarded as being non-toxic<sup>7</sup>.

Spectrochemical or atomic spectroscopic techniques are the most widely used and accepted for the determination of metal(oid) ions in seafood. Selected applications of spectrochemical methods applied to nutrient, trace and (potentially) toxic element determination in various seafood will be presented based on data published in the past 15 years.

1. Rajeshkumar, S.; Li, X. *Toxicol. Rep.* **2018**, *5*, 288.
2. Driscoll, C.T.; Yan, C.; Schofield, C.L.; Munson, R.; Holsapple, J. *Environ. Sci. Technol.* **1994**, *28*, 136A.
3. Korkmaz Görür, F.; Keser, R.; Akçay, N.; Dizman, S. *Chemosphere* **2012**, *87*, 356.
4. Petrović, Z.; Teodorović, V.; Dimitrijević, M.; Borozan, S.; Beuković, M.; Milićević, D. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* **2013**, *90*, 203.
5. Tarley, C.R.T.; Coltro, W.K.T.; Matsushita, M.; de Souza N.E. *J. Food Compos. Anal.* **2001**, *14*, 611.
6. Castro-González, M.I.; Méndez-Armenta, M. *Environ. Toxicol. Pharmacol.* **2008**, *26*, 263.
7. Francesconi, K.A. *Pure Appl. Chem.* **2010**, *82*, 373.

## TiO<sub>2</sub> ÉS WO<sub>3</sub> NANOSZÁL ALAPÚ HIBRID MEMBRÁNOK TOXIKOLÓGIAI VIZSGÁLATA

Mohammed Ahmed Shehab<sup>a</sup>, Németh Zoltán<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Miskolci Egyetem, Anyag és Vegyészmérnöki Kar, 3515 Miskolc, Egyetem út 1.

<sup>b</sup> Miskolci Egyetem, Korszerű Anyagok és Intelligens Technológiák Felsőoktatási és Ipari Együttműködési Központ, 3515 Miskolc, Egyetem út 1.  
zoltan.nemeth@uni-miskolc.hu

Napjaink egyik legintenzívebben kutatott területe a víztisztításhoz kapcsolódó legkülönbözőbb membrántechnológiai kutatások és megoldások, mivel a XXI. század egyik legnagyobb problémája a globális vízhiány, továbbá a szennyezett vizek újrahasznosítás és tisztítása. A membrán elválasztás hatékony módszer a vízkezelő alkalmazásokban, beleértve a szennyvíztisztítást és az ivóvizekben lévő mikroorganizmusok eltávolítását is, de emellett fontos kérdés, hogy a kifejlesztett és alkalmazni kívánt membránok toxicitás szempontjából megfelelőek-e, azaz a használat során a beoldódásból, származó membrán komponensek jelentenek-e további egészségügyi kockázatot. Az Egészségügyi Világszervezet (WHO) jól definiált határértékeket ír elő minden szerves és szervetlen anyagra, így ezen adatok figyelembe vételével és a kifejleszteni kívánt membránok toxikológiai vizsgálataival a fenti kérdést pontosan és egyértelműen meg tudjuk válaszolni.

A növekvő kommunális és ipari vízfogyasztás elengedhetlenné teszi a vízfelhasználási és vízkezelési technológiák újragondolását a környezet megóvása és fenntarthatósága mellett. Nap mint nap új vízkezelési membrántechnológiai megoldások látnak napvilágot a szakirodalomban, de ezek toxikológiai hatásai, vizsgálatai sokszor hiányosak. Kutatásunk során új típusú TiO<sub>2</sub> és WO<sub>3</sub> nanoszál alapú önhordó kompozit membránok fejlesztésével és toxikológia vizsgálataival kívánunk hozzájárulni egy új és környezetbarát alternatíva bemutatásához.

Kutató munkánk során az általunk fejlesztett nanoszál alapú önhordó membránok széles körű anyagtudományi vizsgálatát követően, behatóan tanulmányozzuk azok baktériumokkal és bakteriofágokkal szembeni megtartó képességük és toxikológiai hatásuk vizes közegben. Távlati célunk egy többször használatos, regenerálható membrán család kifejlesztése és annak széles körű alkalmazási lehetőségeinek feltérképezése.

## A PER- ÉS POLIFLUOROZOTT SZÉNHYDROGÉNSZÁRMAZÉKOK (PFAS) VIZSGÁLATA A DUNA MAGYARORSZÁGI SZAKASZÁN

Illés Ádám<sup>a,b</sup>, Esther Orenibi<sup>a,c</sup>, Záray Gyula<sup>a,b,d</sup>

<sup>a</sup>Ökológiai Kutatóközpont, Vízi Ökológiai Intézet, 1113 Budapest, Karolina út 29.

<sup>b</sup>Víz tudományi és Vízbiztonsági Nemzeti Laboratórium, Ökológiai Kutatóközpont, Vízi Ökológiai Intézet, 1113 Budapest, Karolina út 29.

<sup>c</sup>Eötvös Loránd Tudományegyetem, Környezettudományi Doktori Iskola, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A

<sup>d</sup>Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A  
illes.adam@ecolres.hu

Az elmúlt évtizedekben jelentősen megnőtt a per- és polifluorozott szénhidrogén származékok (per- and polyfluoroalkyl substances, PFASs) felhasználása. Ezek a természetben rezisztens vegyületek mérgezőek, bioakkumulálódhatnak, ráadásul a rövid szénláncú molekulák nagy vízoldhatóságuk miatt rendkívül mobilisak a vízi környezetekben. Fő forrásaik a szennyvíztisztító telepek és a szemétkerékek, de ezen új típusú szennyezőket a tűzoltó létesítmények, akkumulátor és papírgyárak is nagy mennyiségben használják.

A PFAS vegyületeket, elsősorban a perfluoroktánsavat (PFOA) és perfluoroktánszulfonsavat (PFOS) kimutatták Európa több folyójában, a ng L<sup>-1</sup> koncentrációtartományban. A Duna teljes hosszán végzett első széleskörű vizsgálat eredményeit 2015-ben publikálták<sup>1</sup>, melyben a PFOA és PFOS koncentrációját 5-40, illetve 5-30 ng L<sup>-1</sup> közötti tartományban detektálták. A magyarországi szakaszon 5-20, illetve 5-15 ng L<sup>-1</sup> koncentrációkat mértek. Folyók és tavak üledékein végzett vizsgálatokban szintén kimutatták ezeket a vegyületeket 1-75 µg kg<sup>-1</sup> száraz tömeg mennyiségben<sup>2</sup>, melyeknek döntő többsége szulfonát volt (perfluoroalkane sulfonates, PFASs).

Kutatásunk célja ezen anyagok koncentrációváltozásának nyomon követése a Duna magyarországi szakaszának vízfázisában és üledékében tizenkét ponton. Ezek közé tartozik Budapest mellett a vizsgált vegyületeket nagy mennyiségben felhasználó komáromi akkumulátor gyár és a dunaújvárosi papírgyár feletti és alatti folyószakasz vizsgálata. A vízfázisból 1 liter mintát szűrés után, szilárdfázisú extrakcióval (SPE) Oasis HLB oszlopon, izotóppal jelölt belső standardek jelenlétében dúsítjuk, majd HPLC-Q-TOF-MS technikával analizáljuk, mellyel célunk a megfelelően alacsony, 5-10 ng L<sup>-1</sup> kimutatási határ elérése. A szedimentek 2-3 grammját az irodalomból átvett<sup>2</sup> és módosított nátrium-hidroxidos – metanolos extrakció után szintén SPE módszerrel dúsítjuk.

Az előadáson bemutatjuk az akkumulátor gyár és a papírgyár hatását a PFAS vegyületek koncentrációjára a vízfázisban és az üledékekben, illetve a vízfázis és szedimentek közötti megoszlásról kapott eredményeinket.

1. Loos, R.; Tavazzi, S.; Paracchini, B.; Fick, J. In: Liska, I., Wagner, F., Sengl, M., Deutsch, K., Slobodník, J. (Eds.), *Joint Danube Survey 3-A Comprehensive Analysis of Danube Water Quality. ICPDR-international Commission for the Protection of the Danube River, Vienna (Austria)*. **2015**, 978-3-200-03795-3.

2. Mussabek, M.; Ahrens, L.; Persson, K.M.; Berndtsson, R. *Chemosphere*. **2019**, 227, pp. 624-629.

## JÓD AKKUMULÁCIÓ VIZSGÁLATA VÍZKULTÚBAN NEVELT KÁPOSZTA NÖVÉNYEK BEN

**Dobosy Péter<sup>a</sup>, Nguyen Thi Phuong Hoang<sup>a,b</sup>, Záray Gyula<sup>a</sup>,  
Endrédi Anett<sup>a</sup>, Christina Strelc<sup>c</sup>, Dieter Ingerle<sup>c</sup>, Philipp Ziegler<sup>c</sup>, Martin Radtke<sup>d</sup>,  
Ana Guilherme Buzanich<sup>d</sup>, Fodor Ferenc<sup>e</sup>**

<sup>a</sup>Ökológiai Kutatóközpont, Vízi Ökológiai Intézet, 1113 Budapest Karolina út 29.

<sup>b</sup>Eötvös Loránd tudományegyetem Biológiai Doktori Iskola,  
1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/C

<sup>c</sup>Atomintitut, TU Wien, 1020 Bécs Stadionallee 2

<sup>d</sup>Bundesanstalt für Materialforschung und-prüfung (BAM),  
12489 Berlin Richard-Willstätter-Straße 11,

<sup>e</sup>Eötvös Loránd Tudományegyetem Biológiai intézet, Növényélettani és Molekuláris  
Növénybiológiai Tanszék, 1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/C  
*dobosy.peter@ecolres.hu*

Napjainkban a világlakosság jelentős része (kb. 2.2 milliárd ember) szenved jódhányban, mely számos egészségügyi kockázatot vonhat maga után, hiszen ezen elem lényeges része az ember fiziológiájának. A jód pótlására az egyik legegyszerűbb megoldás a különböző gyümölcsök és zöldségek jódtartalmának növelése, melynek egyik lehetséges módja a jód hozzáadása a vízkultúrában nevelt növények tápadataihoz.

Munkánk során jodid és jodát vegyületekkel 0.01-1.0 mg/L koncentrációban adagolt, vízkultúrában nevelt káposzta növényeket vizsgáltunk, mely során a növényfiziológiai tulajdonságokat (fotoszintetikus aktivitás, klorofill), nedves- és száraz tömeg alakulását, a jód- és esszenciális tápelemek (kálicum, magnézium, foszfor, kálium, bór, vas, mangán réz, cink) koncentrációk alakulását követtük nyomon.

A kísérletek során megállapítottuk, hogy a jódkezelés nem eredményezett lényeges változást a káposztanövény fotoszintetikus aktivitás, klorofill értékeinek, valamint biomasszájának alakulásában. A jód koncentráció emelése – mindkét kémiai formában – a tápoldatban minden esetben növelte a jód akkumulációját a különböző növényi részekben, a legnagyobb értékeket mindkét kezelési típusnál a gyökérben, legkisebbeket pedig a levél esetében tapasztaltuk. A jodid és jodát kezelések eltérő hatást gyakoroltak a jódfelvételre, a jodid kezelés során nagyobb akkumulációs értékeket sikerült elérni, a káposzta növény ehető részeiben 29 mg/kg, míg jodátnál 12 mg/kg jód koncentrációkat sikerült elérni. Az eltérő típusú kémiai jódforma alkalmazása az esszenciális tápelemek vonatkozásában is eltérően nyilvánult meg, a jodid kezelés során a káposzta ehető részeinek minden tápelemértke csökkent (2-50%) a kontroll növényekhez képest, míg a jodát 1.0 mg/L dózisu alkalmazása során ezen elemek koncentrációja növekedett (2-48%).

## CSODASZEREK A VISSZADOLGOZOTT ANYAG TARTALMÚ POLIOLEFINEK TULAJDONSÁGAINAK JAVÍTÁSÁRA

**Dudás Zsolt, Menyhért Balázs**

*MOL Nyrt Poliolefin R&D Recycling Team, 1117 Budapest, Dombóvári út 28.  
zsdudas@mol.hu*

A műanyagipar, különösen a csomagolóipar egyre nagyobb igényekkel néz szembe a hulladékok visszadolgozása terén, egyre komolyabb szabályzásoknak kell a közeljövőben megfelelni, és erre már most fel kell készülni. Emellett persze a hulladék műanyagok eltávolítása és nyersanyagként való használata, a Föld élhetőbbé tétele sem elhanyagolható feladat.

Az előadás a PCR, azaz a lakossági szelektív gyűjtésből származó HDPE hulladékok felhasználására fókuszál, a cél olyan termékminőség elérése 30-50 % visszadolgozott anyag tartalommal, mint amit az első osztályú (virgin originál) anyag tud. Ehhez több megoldás lehetséges. Az egyik legkézenfekvőbb, hogy a 30-50 % visszadolgozott anyag mellé 50-70 % tiszta anyagot (virgint) keverünk. A tulajdonságok tartása érdekében azonban nem szerencsés a célterméknek megfelelő tiszta anyagot használni itt, hanem attól egy jobb minőségű virginre van szükség. Ahogy egyre igényesebb virgin termékminőséget szeretnénk visszadolgozott anyag tartalmú blendékkel elérni, úgy csökken a lehetőség arra, hogy a virgin rész minősége elegendő legyen a hulladék tulajdonságainak feljavítására. Itt jönnek be az általunk magic, vagy csoda anyagoknak nevezett adalékok, vagy módosító szerek (a jó értelemben).

Mik is lehetnek ezek a csodaszerek. Lehetnek szagmegkötő, vagy átalakító adalékok, lehetnek tulajdonság módosító szerek, mint például különböző stabilizátorok, gócképzők, vagy peroxidok, amely utóbbival jelen előadásunkban foglalkozunk.

A peroxidokat általában móltömeg csökkentésre használjuk polipropilén esetén, amivel például a könnyebbé válik fröccsöntéssel előállított termékek gyártása. Polietilén esetén a peroxidok móltömeg növekedést okoznak az elágazások számának vagy rosszabb esetben a keresztkötések számának növelésével. Ez utóbbi esetben kapjuk a térhálós polietilént, amit habosított formában alkalmaznak, vagy hőálló (alaktartó) csövekként. Ebben az esetben olyan szerkezet alakul ki, amivel már egyáltalán nem érhető el a céltermék minőség, illetve az anyag a hagyományos, hőre lágyuló műanyagoknál működő módszerekkel nem lesz feldolgozható.. Megoldást nyújthat speciális peroxidok fejlesztése, és a megfelelő mennyiségű és formájú peroxid adagolás.

Sikerült olyan peroxidokat fejleszteni partnereinkkel együttműködve, amelyek segítségével olyan eredményeket értünk el, amelyet a polimerizációval előállított anyagok esetén nem voltak lehetségesek, így igényesebb termékeket lehet előállítani hasonló, vagy komolyabb felhasználási területre. Nem titkolt cél a tapasztalatok átültetése 30-50 % hulladék tartalmú blendék tulajdonságainak javítására. Az előadásunkban bemutatjuk első sikereinket.

## A MAGYARORSZÁGI ÉPÜLETEK RADON-FELMÉRÉSE

Homoki Zsolt<sup>a,b</sup>, Szigeti Ágnes<sup>a</sup>, Osváth Szabolcs<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Nemzeti Népegészségügyi Központ, Sugárbiológiai és Sugáregészségügyi Főosztály,  
1221 Budapest, Anna utca 5.

<sup>b</sup> Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Anyagtudományok Doktori Iskola,  
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.  
radon@nnk.gov.hu

Egy országos kiterjedésű vizsgálati program indult 2021-ben a Nemzeti Népegészségügyi Központ szervezésében. A program célja a lakóterek és munkahelyek levegőjében lévő radon aktivitáskoncentrációjának felmérése, valamint a népesség széleskörű tájékoztatása az esetleges egészségügyi kockázatok tekintetében.

A radon az emberi érzékszervekkel még nagy koncentrációban sem észlelhető, színtelen, szagtalan, íztelen nemesgáz. Radioaktív, és szintén radioaktív, szilárd, fémes elemekké bomlik. A radon külsőleg nem veszélyes. Gázként belélegezve, a tüdőben csak kis mértékben szívódik fel és jut be a véráramba. A bomlástermékei azonban rövid időn belül kiülepednek a levegőben úszó porszemcsék felületére. Ezeket belélegezve megtapadhatnak a tüdőhörgők elágazásaiban, és ott közvetlenül besugarazzák a tüdő szövetét. A magas radonszint tartós, évtizedeken keresztül belélegezése hozzájárulhat a tüdődaganat kialakulásához. A dohányzás után a radon a tüdőrák kialakulásának második legfőbb azonosított kockázati tényezője.

A radon a szabadban eloszlik, így csak épületek zárt tereiben tud felgyülemelni, ahova nagyrészt a talajból, kisebb részt az építőanyagokból juthat be. (Ez utóbbiak közül a salakok hozzájárulása a leginkább említésre méltó.) A radon program egyik célkitűzése a hazai lakóterek és munkahelyek radonszintjének a megismerése; továbbá annak vizsgálata, hogy vannak-e regionális talajtani adottságokhoz vagy építészeti kialakításokhoz köthető eltérések.

A vizsgálatba bevont helyszíneken összesen egy éven keresztül szükséges a radon szintet mérni. Erre azért van szükség, mert a radon koncentrációja nagyon tág határok között, akár rövid, óras időtartamon belül is változhat, például szellőztetés hatására. Az egészségügyi kockázatot a hosszú idejű átlagos kitétség alapján lehet csak értékelni.

A méréshez kisméretű (alig nagyobb, mint egy gyufásdoboz) nyomdetektorok kihelyezése szükséges pl. egy polcra, szekrényre vagy asztalra. Az éghajlati adottságok miatt az évszakos lakáshasználat akár jelentős eltéréseket mutathat, ezért az egy évet négy 3 hónapos időszakra bontva vizsgáljuk – vagyis egy-egy helyszínen a detektorokat negyedévente cseréljük.

A felméréshez olyan résztvevők jelentkezését várjuk, akik vállalják, hogy az NNK által kiküldött detektorokat fogadják, azokat környezetükben kihelyezik és 3 hónap elteltével postai úton visszaküldik az NNK címére. A felmérésben való részvétel a jelentkezők számára a postai visszaküldés költségén felül egyéb terhet nem jelent.

A résztvevőkkel megosztjuk az adott helyszín vizsgálati eredményeit. Általános közzétételre egyedül csak a feldolgozott, aggregált statisztikai adatok kerülnek majd, amelyekből az egyedi mérések eredményére, a vizsgálatban résztvevők adataira nem lehet következtetni.

Az intézetünk által eddig vizsgált közel 500 épületben az éves átlagos beltéri radonszint az esetek 5 %-ában haladta meg a 300 Bq/m<sup>3</sup>-es hazai viszonyítási szintet, és az esetek kevesebb, mint 2 %-ában a 450 Bq/m<sup>3</sup>-es, emelkedettnek mondható radon szintet.

## A VUV FOTONOK SZEREPÉNEK VIZSGÁLTA TRIMETOPRIM VIZES OLDATÁNAK UV/VUV/PDS ELJÁRÁSSAL VALÓ KEZELÉSE SORÁN

**Alapi Tünde, Farkas Luca, Szirmai Adrienn**

*Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék,  
6720 Szeged Dóm tér 7-8.  
alapi@chem.u-szeged.hu*

Az antibiotikum rezisztens baktériumok által okozott fertőzések és annak következményei napjaink egyik súlyos közegészségügyi problémájává vált. Az antibiotikum hatóanyagok részben a kórházi és kommunális, valamint az állattartásból származó szennyvizekkel kerülnek a környezetünkbe. A biológiai vízkezelés hatékonysága azonban korlátozott, így azok maradéktalan eltávolításához további kiegészítő vízkezelési eljárások szükségesek, melyek többnyire gyökgeneráláson alapulnak. A hidroxilgyök ( $\bullet\text{OH}$ ) mellett napjainkban egyre több figyelmet kapnak a szulfátgyök ( $\text{SO}_4^{\bullet-}$ ) generálásán alapuló módszerek, melynek előállítása igen gyakran peroxodiszulfát ion ( $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ , PDS) aktiválásán keresztül valósul meg. Az egyik lehetőség erre a PDS UV fotolízise, melyhez a vízkezelésben elterjedten alkalmazott 254 nm-en sugárzó kisnyomású higanygőzlámpákat használnak. Ezek a fényforrások nagytisztaságú kvarc búrával ellátva nem csupán 254 nm-en, hanem 185 nm-en is sugároznak. A 185 nm-es VUV fény elegendő energiával rendelkezik a víz fotolíziséhez, melynek során abból közvetlenül  $\bullet\text{OH}$  képződik, hatékonyan megnövelve a szerves vegyületek átalakulásának és mineralizációjának sebességét.

Az UV/PDS és UV/VUV/PDS eljárásokat a trimetoprim, egy antibakteriális hatású gyógyszer hatóanyag bontása során vizsgáltuk. Azonos PDS és trimetoprim koncentrációk mellett az UV/VUV/PDS eljárás hatékonysága jelentősen meghaladta az UV/PDS módszerét. Célunk elsősorban a kis intenzitású VUV fény szerepének és hatásának részletesebb megismerése, a  $\text{SO}_4^{\bullet-}$  generálásában betöltött szerepének vizsgálata és a megnyilvánuló szinergizmus okának feltárás volt. A víz 185 nm-re vonatkozó és a PDS 254 nm-re vonatkozó moláris abszorbanációját figyelembe véve, feltérképeztük hogyan változik a  $\bullet\text{OH}$  és  $\text{SO}_4^{\bullet-}$  hozzájárulásának mértéke a lámpa falától való távolság függvényében. Eredményeink alapján a 185 nm-es fény nem csak a víz, hanem a PDS VUV fotolízisén keresztül is jelentősen hozzájárul a gyökképződéshez. A  $\bullet\text{OH}$  és  $\text{SO}_4^{\bullet-}$  hozzájárulása a trimetoprim átalakulásához függ a PDS koncentrációjától és a besugárzott oldatréteg vastagságától is. A két gyöknek a trimetoprim átalakulásában betöltött szerepét metanol és terc-butanol gyökfogók hatásán keresztül is vizsgáltuk.

A biológiai tisztított kommunális szennyvíz, mint mátrix csökkentette a hatékonyságot, részben a szervetlen ionok reakciói miatt. A  $\text{Cl}^-$  hatása elsősorban a klórozott köztitermékek képződésén, míg a  $\text{HCO}_3^-$  gyökfogó hatása a mineralizáció sebességének csökkentésén keresztül nyilvánult meg. A képződő másodlagos gyökök ( $\text{Cl}^\bullet$  és  $\text{CO}_3^{\bullet-}$ ) reakciói hatással lehetnek a  $\text{SO}_4^{\bullet-}$  generálásán alapuló eljárások hatékonyságára. Eredményeink hozzájárulhatnak az UV/PDS és UV/VUV/PDS eljárások optimalizálásához, valamint az alkalmazásukat korlátozó tényezők megismeréséhez.

A szerzők köszönik az Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) FK132742 számú OTKA pályázat támogatását. Farkas Luca köszöni a Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-3-SZTE-398 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Program támogatását.

## KOMMUNÁLIS SZENNYVÍZTISZTÍTÓ ÁLTALI MIKROMŰANYAG ÉS TEXTILSZÁL EMISSZIÓ

**Davaakhuu Tserendorj<sup>a,b</sup>, Károlyi Ágnes<sup>c</sup>, Szalai Rita<sup>c</sup>, Illés Ádám<sup>a,b</sup>,  
Baranya Sándor<sup>d,e</sup>, Dobosy Péter<sup>a,b</sup>, Záray Gyula<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>Ökológiai Kutatóközpont, Vízi Ökológiai Intézet, 1113 Budapest Karolina út 29.

<sup>b</sup>Víztudományi és Vízbiztonsági Nemzeti Laboratórium, Ökológiai Kutatóközpont, Vízi Ökológiai Intézet, 1113 Budapest Karolina út 29

<sup>c</sup>Nemzeti Szakértői és Kutató Központ, Fizikai és Kémiai Szakértői Intézet  
Mikroanyagmaradvány Vizsgáló Osztály, 1087 Budapest, Mosonyi utca 9.

<sup>d</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Építőmérnöki Kar, Vízépítési és  
Vízgazdálkodási Tanszék, 1111 Budapest Műegyetem rakpart 3

<sup>e</sup>Víztudományi és Vízbiztonsági Nemzeti Laboratórium, Budapesti Műszaki és  
Gazdaságtudományi Egyetem, Építőmérnöki Kar, Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék,  
1111 Budapest Műegyetem rakpart 3

Az 1-5000 mikrométer mérettartományba eső mikroműanyagok jelentős hányadát adják a mikroszálak, amelyek a különböző ruhaneműk mosása során válnak le a textilmátrixból és a szennyvízzel jutnak el a háztartásokból és ipari mosodákból a folyók partjára telepített kommunális szennyvíztisztító telepekre. A textíliák alapanyagától függően természetes eredetű (pl. pamut, gyapjú, len, kender), mesterséges úton növényi alapanyagokból gyártott cellulóz-bázisú szálak (viszkóz, rayon) és szintetikus polimerekből előállított szálak (poliészter, poliamid, polipropilén stb.) egyaránt jelen vannak a szennyvíztisztítók befolyó vizében. A szálakon túlmenően műanyag fragmensek és fóliák képezik a másik részecskecsoportot. Az alkalmazott tisztítási technológiától függően ezen szennyezők 75-90%-a eltávolításra kerül a primer és szekunder tisztítási lépcsőkben és a szennyvíziszapban halmozódik fel. Tercier lépcső alkalmazásánál akár 98%-os eltávolítás is elérhető. Irodalmi adatok alapján a tisztított szennyvíz átlagosan  $10^4$  szál/ $m^3$  szálkoncentrációval jellemezhető, ami egy 100000  $m^3$ /nap kapacitású átlagos szennyvíztisztítót alapul véve mintegy  $1.0 \cdot 10^9$  természetes szál és műszál Dunába történő transzportját eredményezi. A textilszálak 50-60 mikrométernél kisebb átmérőjüknek és gyakran 50-nél nagyobb hossz/átmérő arányuknak köszönhetően a vízi ökoszisztéma élőlényei (pl. halak, rákok, kagylók stb.) emésztőrendszerébe jutnak, ahol káros gyulladási folyamatokat indukálhatnak a festék és töltőanyagaik révén, továbbá transzporter szerepet töltenek be a felületükön kialakult biofilmekhez kötődött kemikáliák (pl. peszticidek, perfluorozott vegyületek, nehézfémek) szempontjából. Figyelembe véve a természetes és a mesterségesen előállított cellulóz-bázisú szálak gyorsabb biológiai lebonthatóságát, tiszta képet kell adni a hosszú élettartamú szintetikus polimerszálak részarányáról. Ennek érdekében meg kell oldani a reprezentatív mintavételt, a szilárd szuszpendált részecskék vízfázisból történő eltávolítását és frakcionálását, a biofilmek eltávolítását az üvegszálás szűrőkön felfogott részecskékről, a visszamaradt szilárd részecskék (többnyire szálak) méret, alak, és szín szerinti jellemzését sztereo- és fluoreszcens mikroszkópokkal, majd kémiai azonosítását FTIR és/vagy Raman spektrometriai módszerekkel.

Az előadásban bemutatjuk egy Budapesten üzemelő szennyvíztisztító kifolyónál vett kezelt szennyvízminutákra vonatkozó eredményeinket összevetve az irodalmi adatokkal.

## PORÓZUS ANYAGOK JELLEMZÉSE NMR RELAXÁCIÓS MÓDSZEREKKEL

**Kéri Mónika<sup>a</sup>, Nyul Dávid<sup>a</sup>, Papp Vanda<sup>a,b</sup>, Novák Levente<sup>a</sup>, Bányai István<sup>a</sup>**

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

<sup>b</sup> Isotoptech Zrt., 4026. Debrecen, Bem tér 18.

keri.monika@science.unideb.hu

Porózus anyagok szerkezetének jellemzésére számos jólismert, gyakran alkalmazott módszer áll rendelkezésre, úgy, mint a N<sub>2</sub> gázporozimetria, vagy a mikroszkópos és szórásos technikák. A pórusos anyagok lehetséges, elsősorban folyékony közegben megvalósuló alkalmazása szempontjából azonban kiemelt fontosságú a folyadékkal való kölcsönhatás, a szilárd/folyékony határfelületi tulajdonságok, vagy a pórusos struktúra folyadék hatására történő megváltozásának leírása. Bizonyos NMR (Nuclear Magnetic Resonance, mágneses magrezonancia) spektroszkópiai módszerek átfogó megoldást nyújtanak a szilárd struktúrák roncsolásmentes vizsgálatára a pórusokat kitöltő folyadékon keresztül. Számos olyan kérdés felmerülhet, amire az NMR relaxometria, krioporozimetria, diffúziometria vagy ezek együttes alkalmazása választ adhat:

- Változik-e a morfológia az alkalmazás körülményei között, vagyis nedves állapotban? A krioporozimetria megadja a pórusok méretét<sup>1</sup>, de a folyadék protonjainak  $T_2$  relaxációs időállandója, és a folyadék molekulák gátolt diffúziójának mértéke is függ a pórusmérettől.
- Milyen folyadék doméneket találunk a vizsgált porózus rendszerben és milyen a folyadék eloszlása azokban?  $T_2$  relaxációs időállandójuk alapján a különböző domének, folyadéktípusok elkülöníthetőek, és 2D korrelációs spektrumok segítségével leírható azok kapcsolata.
- Hogyan történik a pórus feltöltődése folyadékkal? A folyadék  $T_2$  relaxációs időállandójának változása a feltöltődés során információt szolgáltat a feltöltődés mechanizmusáról.<sup>2</sup>
- Hogyan viselkedik a szilárd felület a nedvesedés során? Mennyire hidrofób vagy hidrofil? Különböző polaritású tesztfolyadékokkal feltöltve a pórusokat az NMR relaxometriás és krioporozimetriás mérések választ adnak ezekre a kérdésekre.
- Hogyan mozog a folyadék a pórusrendszerben? NMR diffúziometriával megadható a folyadék molekulák saját diffúziós együtthatója, mely utalhat a rendszer átjárhatóságára, vagy akár gőzdiffúzió is megfigyelhető részben töltött pórusok esetén.

Az előadásban a kérdésekre adott válaszokat változatos és látványos példákon (pl.: szén aerogélek<sup>3</sup>, kőzetek, cement- és geopolimer kötőanyagok) keresztül mutatjuk be.

1. Petrov et al., *Prog. Nucl. Magn. Res. Spec.*, **2009**, 54(2): p. 97-122

2. A. Bede, A. Scurtu, I. Ardelean, *Cement and Concrete Research*, 89, 56-62, **2016**

3. M. Kéri, D. Nyul, K. László, L. Novák, I. Bányai, *Carbon*, 189, 57-70, **2022**.

A RH/322-2/2022 számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a KDP-2021 pályázati program finanszírozásában valósult meg. A kutatást a NKFIH (PD 135169, K 131989) támogatta.

## POSZTEREK

## SUITABILITY OF ULTRA PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY FOR DETERMINATION OF POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS FROM COOKING EMISSIONS

Nani Apriyani<sup>a</sup>, Marta Keller<sup>b</sup>, Anikó Vasanits<sup>c</sup>, Szabolcs Béni <sup>a</sup>, Andrea Cattaneo<sup>b</sup>, Victor G. Mihucz<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Department of Pharmacognosy, Semmelweis University,  
Üllői út 26, 1085 Budapest, Hungary

<sup>b</sup> Department of Science and High Technology, University of Insubria,  
Via Valleggio 11, 22100 Como, Italy

<sup>c</sup> Institute of Chemistry, ELTE - Eötvös Loránd University,  
Pázmány Péter sétány 1/A, H-1117 Budapest, Hungary  
nani.apriyani@phd.semmelweis.hu

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are ubiquitous in the environment due to incomplete combustion or pyrolysis of solid fuels, biomass, waste during industrial or other human activities<sup>1</sup>. Thus, emission of PAHs has been reported during cooking activities involving barbecuing, smoking, drying, roasting, baking, frying or grilling<sup>2</sup>. Lower molecular weight (MW) PAHs can mainly be found in the gas phase, while less volatile higher MW PAHs can be adsorbed to particulate matter. Several PAHs have mutagenic and carcinogenic effects<sup>3</sup>. The US Environmental Protecting Agency (EPA) has indicated 16 PAHs as the most frequently occurring in environmental samples. In 2008, the European Food Safety Authority (EFSA) proposed a list containing 15 PAHs and benzo[c]fluorene considered to be relevant by the Joint FAO/WHO Experts Committee on Food Additives (JECFA) in food. These 15+1 EU PAHs only have 8 PAHs in common with the 16 US EPA priority PAHs traditionally monitored in environmental. For the routine surveillance of food for these 15+1 EU priority PAHs, sensitive analytical techniques are necessary. Thus, determination of PAHs from environmental matrices is frequently based on gas chromatography-mass spectrometry and high performance liquid chromatography with fluorescent detection. For the 15+1 EU PAHs, LC-based techniques are recommended<sup>4</sup>. Due to its power for increasing sample throughput, chromatographic efficiency, sensitivity and decreasing run time and solvent consumption, ultra-performance liquid chromatography (UPLC) seems to be a suitable choice for PAH determination. Therefore, the aim of this work was to explore suitability of UPLC coupled with diode array ultraviolet detector for separation of the 16 US EPA priority and 15+1 EU PAHs emitted during cooking activities performed in restaurant kitchens to assess occupational exposure.

1. Srogi, K. *Environmental Chemistry Letters*. **2007**, 5, 169.

2. Jira, W. *Eur. Food Res. Technol.* **2010**, 230, 447.

3. Tsutsumi, T.; Adachi, R.; Matsuda, R.; Watanabe, T.; Teshima, R.; Akiyama, H. *J. Food Prot.* **2020**, 83, 692.

4. Germán-Hernández, M.; Pino, V.; Anderson, J.L.; Afonso, A.M. *Talanta* **2011**, 85, 1199.

## APPLICATION OF PHOTO-CROSSLINKERS FOR MAPPING KBTBD4-LIGAND INTERACTION

**Tímea Baló<sup>a,d</sup>, Tímea Szabó<sup>a</sup>, Virginie Martiny<sup>b</sup>, András Herner<sup>a</sup>, David Brown<sup>b</sup>,  
Zhuoyao Chen<sup>c</sup>, Alex Bullock<sup>c</sup>, András Kotschy<sup>a</sup>**

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

<sup>b</sup> Servier R&D Institute, 91190 Gif-sur-Yvette, Rue Francis Perrin, France

<sup>c</sup> University of Oxford, Centre for Medicines Discovery Department, Nuffield Department of Medicine, Oxford, OX3 7FZ, UK

<sup>d</sup> Eötvös Loránd University, Department of Organic Chemistry, 1117 Budapest, Pázmány Péter s. 1/A  
timea.balo@servier.com

The ubiquitin proteasome system (UPS) is a major player in the regulation of the natural cycle of proteins in our body. Targeted protein degradation (TPD) through E3 ligases (which is a key element of the UPS) offers a new therapeutic method to cure diseases via the removal of the unwanted or overexpressed proteins responsible for the phenotypic effect.

The KBTBD4 protein is part of the E3 ligase family which has more than 600 members. Since less than 10 out of them is used daily in the TPD, expansion of applicable E3 ligases in this area would be inevitable. Currently, the structure of KBTBD4 protein is unknown, however there is a small molecular binder, namely UM171, which is in phase II clinical trial with oncologic indications<sup>1</sup>. However, the mechanism of action is still not understood completely, the UM171 seems to act as a molecular glue in a ternary complex with KBTBD4 and LSD1-CoRest-complex. To specify and examine the binding mode of this small molecule we designed 3H-diazirine based photo-crosslinkers containing UM171 analogues as well as negative controls. Photoaffinity labeling is widely used to map protein-ligand interactions<sup>2</sup>. While the diazirine is chemically stable precursor, upon UV radiation it decomposes fast to nitrogen and a reactive carbene. Latter can insert even into C-H bond and form a stable covalent bond with the nearest amino acid. We assume that with these photoaffinity probes the binding mode and site will be revealed and gain more structural information about the ligand-protein interaction. This discovery would enable to start a structure-based drug design process.

1. Chagraoui, J.; Girard, S.; Spinella, J.-F.; Simon, L.; Bonneil, E.; Mayotte, N.; MacRae, T.; Coulombe-Huntington, J.; Bertomeu, T.; Moison, C.; Tomellini, E.; Thibault, P.; Tyers, M.; Marinier, A.; Sauvageau, G. *Cell Stem Cell* **2021**, 28, 48–62.

2. Hill, J. R.; Robertson, A. A. B. *J. Med. Chem.* **2018**, 61, 6945-6963.

## KÖVETKEZŐ GENERÁCIÓS, MEGÚJULÓ TENZIDEK: SZINTÉZIS ÉS MÉRETNÖVELÉS

**Batha Bálint, Schwaiger Stefan, Hochegger Markus, Barta-Weissert Katalin**

*Institute of Chemistry, University of Graz, Heinrichstraße 28, 8010 Graz, Austria  
balint.batha@uni-graz.at*

Modern társadalmunk szinte kizárólag olyan termékeken alapszik, melyek fosszilis forrásból kerültek előállításra. Az egyre fenyegetőbb klímaválság azonban hatalmas terhet ró a vegyiparra annak érdekében, hogy alternatív lehetőségeket és folyamatokat találjon az igények kielégítésére.<sup>1</sup> Példaként említhetők a felületaktív anyagok, melyeket éves szinten mintegy 40 millió tonna nagyságrendben állítanak elő.<sup>2</sup> Ezen anyagok fő alkalmazási területei közé sorolhatók az általános és specifikus tisztítási feladatok az otthonainkban, kórházakban és az ipar legkülönbözőbb területein, valamint széleskörűen használják őket a gyógyszerek-, élelmiszerek-, festékek- és kozmetikumok formulálásában. A jelenleg alkalmazott tenzidek kb. 50% teljesen fosszilis forrásból származik, és nagyságrendileg 3%-uk rendelkezik 95% feletti megújuló széntartalommal.<sup>3</sup> Fontos megjegyezni, hogy a jelenleg használt megújuló erőforrások jellemzően Dél-Kelet Ázsiából importált alapanyagok (pl.: pálmaolaj), amelyek jelentős importfüggőséget eredményeznek az európai piac számára.

PureSurf EIC Transition projekt keretein belül olyan, kiváló tulajdonságokkal rendelkező, felületaktív anyagok fejlesztésén és méretnövelésén dolgozunk, amelyek lokálisan elérhető, megújuló alapanyagokból épülnek fel. Platformstratégiánk olyan anyag- és hulladékáramokat hasznosít, melyek potenciálja nagyrészt kiaknázatlan. Példaként említhetjük a papírgyártás során keletkező lignint, a használt sütőolajat vagy a különböző lignin depolimerizálási termékeket. Mostanáig egy 40+ tenzidből álló portfóliót építettünk fel, valamint két PCT szabadalmat jegyeztettünk be. Minden molekulánk 1-1 ligninből származó aromás monomerre épül, amely összekapcsolja a felületaktív anyag, trigliceridekből származó, hidrofób alkilcsoportot a hidrofíl résszel. Az anyagok fizikai-kémiai tulajdonságai rendkívül kedvezőek, beleértve a jelenlegi iparági sztenderdekénél két nagyság-renddel alacsonyabb kritikus micellakonzentrációt és az oktadecil láncok ellenére kiváló viselkedést alacsony hőmérsékletű tartományban is. Az új, javasolt szintézissorok tervezésénél figyelembe vettük az elérhető ipari folyamatokat és az alapanyagok beszerzési lehetőségeit. Az általunk alkalmazott reakciók többsége jól ismert mind laboratóriumi-, mind ipari szinten. Az egyszerűségekre való törekvés, beleértve az atmoszférikus nyomás és nem túlságosan magas hőmérsékletek alkalmazását, valamint a korrozív és/vagy toxikus reagensek használatának mellőzését, szintén növeli az ipari megvalósíthatóságot, továbbá csökkenti a beruházási- és üzemeltetési költségeket egy eredendően biztonságosabb folyamatot eredményezve. Projektünk távlati célja a piacra való belépés, így megfontolt molekulatervezésen és a megújuló nyersanyagok használatán túl a reakcióink megvalósítása nagy méretben kritikus jelentőséggel bír. Következésképpen elkerülhetetlen a méretnövelési folyamat vizsgálata koncepcióink bizonyítása érdekében, ideértve a hőátadás és a keverés hatékonyságának teljeskörű vizsgálatát.

European  
Innovation  
Council



Funded by  
the European Union

*The PureSurf Project is funded by the European Union's  
Horizon Europe Transition program under Grant  
Agreement No. 101058142.*

1. The European Green Deal; [Publications Office of the European Union], 2020.
2. Staszak, K., Wieszczycka, K., Tylkowski, B. (2020). *Chemical Technologies and Processes*, De Gruyter, Berlin, 2020
3. K. Esther-Joseph, C. Krumm, *INFORM International News on Fats, Oils, and Related Materials* 2017, 28, 16–19.

## **COFFEA ARABICA RONCSOLÁSMENTES VIZSGÁLATA A ZÖLD KÁVÉTÓL AZ ITALIG**

**Benes Eszter Luca<sup>a</sup>, Fodor Marietta<sup>a</sup>, Gere Attila<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet  
Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék, 1118, Budapest, Villányi út, 29-43.

<sup>b</sup> Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet  
Árukezelés, Kereskedelem, Ellátási Lánc és Érzékszervi Minősítési Tanszék,  
1118, Budapest, Villányi út, 29-43.  
*benes.eszter.luca@uni-mate.hu*

A kávé annak ellenére az egyik legnagyobb mennyiségben forgalmazott termék világszerte, hogy nem egy alapvető élelmiszer, hanem egy élvezeti cikk. A kávé minőségét, ezáltal az árát számos fiziko-kémiai, ezeken keresztül pedig számos érzékszervi tulajdonság, a növény genetikája, és a származási hely is befolyásolja. Emellett a zöld kávé kémiai összetételének ismerete segítheti a profi pörkölőket a pörkölési folyamat szabályozásában, ezáltal az általuk kívánt érzékszervi profil beállításában.

A kutatás fókuszában a közeli infravörös spektroszkópia (NIRS), és a különböző kemometriai módszerek alkalmazásában rejlő lehetőségek vizsgálata állt, a kávé fiziko-kémiai és érzékszervi tulajdonságaival összefüggésben.

A mérésekhez ötven zöld kávé szerezünk be négy termesztési régióból, huszonhárom országból. Emellett elvégeztük a minták pörkölését és vizsgáltuk az eltérő pörkölési idő hatását a kávébabok színére, pH értékére, koffeintartalmára, a különböző klorogénsavak mennyiségére, az érzékelt savasságra és keserűsége, ill. a spektrális tulajdonságokra. A NIR spektrumok rögzítését egy Bruker MPA FT-NIR készülékkel (Bruker, Ettlingen, Németország) végeztük diffúz reflexiós elrendezéssel; a színmerést pedig egy Konica-Minolta CR-410 színmérővel (Konica Minolta Sensing Inc., Osaka, Japán) a CIE Lab színtérben. A minták összes savtartalmát potenciometriás módszerrel, pH-érzékeny elektróddal (Hanna Instruments, Woonsocket, USA) mértük. A kávébabban található koffein és klorogénsavak mennyiségi meghatározása folyadékkromatográfiás elválasztás után UV (Agilent Technologies, Kalifornia, USA), ill. tömegspektrometriás (Shimadzu, Kiotó, Japán) detektálás mellett történt.

A referencia adatok és a spektrális adatok közti összefüggés legtöbb esetben modellezhető korszerű kemometriai módszerekkel, amelyek megfelelő osztályozási és előrejelzési képességekkel rendelkeznek. Az FT-NIR spektroszkópia alkalmas mind zöld, mind pörkölt szemes kávé pH-értékének, koffein-, 5-, 4-, 3-CQA, 3,5-diCQA tartalmának mennyiségi becslésére regressziós modellekkel, míg zöld kávé estén a 4,5-diCQA és a 3-FQA mennyiségi becslése is sikeres. Ezenkívül alkalmazható az érzékelt savasság és keserűség előrejelzésére is, különböző pörkölésű kávék esetén. A zöld kávéminták spektrális adatain lineáris és nem lineáris kemometriai módszereket futtattunk, ezáltal megállapítottuk, hogy a vizsgált adatkészlet felhasználásával a modellek teljesítőképessége bináris rendszerekben a legjobb. Az optimális modellek eléréséhez általában szükséges valamilyen adat-előkezelés, emellett változó kiválasztási eljárások alkalmazása is ajánlott, a kávé komplex molekuláris rezgéseiből adódóan. A létrehozott NIR spektroszkópián alapuló modellek egyszerűen és gyorsan alkalmazhatók közvetlenül szemeskávé roncsolásmentes vizsgálatára.

## ELEKTRONIKUS HULLADÉKOK ELEMÖSSZETÉTELÉNEK VIZSGÁLATA NUKLEÁRIS ANALITIKAI MÓDSZEREKKEL

**Buczko Noémi Anna, Maróti Boglárka, Gméling Katalin, Szentmiklósi László**

*Energiatudományi Kutatóközpont, Nukleáris Analitikai és Radiográfiai Laboratórium,  
1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.  
buczko.noemi@ek-cer.hu*

Az elektromos és elektronikus hulladékok napjainkra az egyik fő környezeti problémává váltak. Az ilyen típusú hulladékok újrahasznosítása jelentősen tudná csökkenteni a környezetre gyakorolt hatásukat és értékes másodlagos nyersanyagforrást biztosítani az ipar számára. Ehhez szükséges a hulladékok elemösszetételének ismerete, amely igen gyakran nem ismert, ekkor meg kell határozni újrahasznosítás előtt. A kutatás során célunk különböző elektromos és elektronikus hulladékok elemösszetételének meghatározása neutron alapú módszerek, prompt-gamma aktivációs analízis (PGAA), műszeres (INAA) és kivezetett nyalábos (in-beam) neutron aktivációs analízis, kombinációjával. A végső célunk egy validált módszertan megalkotása, amely alkalmas az ilyen hulladékok elemösszetételének átfogó elemzésére. Emellett a gyorsabb, olcsóbb és könnyebben hozzáférhető kézi röntgenfluoreszcencia spektroszkópia (pXRF), alkalmazhatóságát és korlátait is vizsgáljuk.

Munkánk során különböző hulladékok, mint például memória kártyák, LED fényforrások, merevlemezek, napelemek stb. elemösszetételét vizsgáltuk. A kutatás során az értékes, illetve veszélyes elemekre, valamint az európai gazdaságban nagy jelentőséggel rendelkező és emellett magas ellátási kockázatú elemekre összpontosítottunk (kritikus elemek). Az egyes hulladékfajták elemösszetételét megmértük -a hulladék típustól függően- szétbontás, illetve őrlés és homogenizálás után PGAA-val, műszeres NAA-val és in-beam NAA-val is. Továbbá a PGAA és in-beam NAA módszerek alkalmazhatóságát vizsgáltuk a hulladékok elemösszetételének mintaelőkészítés nélküli meghatározására is.

Az egyes módszerek jellemzően egymást kiegészítő információt szolgáltatnak az elemösszetételről. A módszereink kombinációjával sok értékes, kritikus, illetve veszélyes elem vált mérhetővé a különféle elektronikai hulladékokban pl., Au, Ag, Cu, Ga, In, Br, Cd, La, Ce, Nd, Eu, Lu, Y, stb. Azon elemeket, amelyek több módszerrel mérhetőek voltak az egyes módszerek kereszt-validálására használtuk. A többféle módszerrel mért nyers koncentrációk között eleinte több esetben szignifikáns eltérést találtunk. Ezen eltérések okait -úgy mint a nem detektált főkomponensek torzító hatása és a nem elhanyagolható neutron önárnyékolás - felderítettük és egyedi korrekciókat vezettünk be. A szükséges korrekciók alkalmazása után az egyes módszerekkel mért koncentrációk jól egyeztek egymással.

A neutron alapú módszerekkel és a kézi XRF berendezéssel mért koncentrációk között szignifikáns eltérést találtunk, még az őrlt és homogenizált minták esetén is. Ennek a feltételezett oka a gyári mátrixkalibráció hiánya. Jövőben tervezzük saját, mátrixkalibráció kidolgozását kézi XRF berendezéshez, a neutron-alapú módszerek eredményei alapján.

## GYÓGYSZER HATÓANYAGOK VIZES OLDATÁNAK KEZELÉSE UV/KLÓR ELJÁRÁSOKKAL

**Covic Anett, Csaplár Constance, Farkas Luca, Alapi Tünde**

*Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék,  
6720 Szeged Dóm tér 7-8.  
covicanett@chem.u-szeged.hu*

A környezetünkbe kerülő szennyezők közül kiemelkedő jelentőséggel bírnak a gyógyszer hatóanyagok összetett környezeti, ökológiai és népegészségügyi hatásuk miatt. A konvencionális víztisztítási technológiák nem elegendően hatékonyak ezen szennyezők maradéktalan eltávolítására, ami kiegészítő víztisztítási technológiák fejlesztését teszi szükségessé. A vízkezelésben klórtartalmú vegyületeket elsősorban fertőtlenítésre alkalmaznak, azonban napjainkban egyre nagyobb figyelmet kapnak egyes klórtartalmú vegyületek és UV fény együttes alkalmazásán alapuló ún. UV/klór eljárások, melyek gyökgeneráláson keresztül a szerves szennyezők átalakítására is alkalmasak.

Munkánk során két modellvegyület a trimetoprim (antibiotikum hatóanyag) és az 5-fluorouracil (kemoterapiás antimetabolit) átalakulását vizsgáltuk UV/ClO<sub>2</sub> eljárással, 367 nm-en sugárzó LED fényforrásokkal használva. Vizsgáltuk a ClO<sub>2</sub> koncentráció (0 - 14 ppm), a pH (3,0 – 8,0), a fényintenzitás és a LED-ek elektromos teljesítményének (1,4 - 6,4 W) hatását a ClO<sub>2</sub> fotolízisének és a két modellvegyület átalakulásának sebességére.

Vizsgálataink során mindkét vegyület esetén optimalizáltuk a ClO<sub>2</sub> koncentrációt és a LED-ek teljesítményét. Az UV/ClO<sub>2</sub> eljárások esetén számos reaktív részecske képződhet, többek között ClO<sup>•</sup>, <sup>•</sup>OH, O<sub>2</sub><sup>•-</sup>, O<sub>3</sub> és számos klórtartalmú gyök. Az UV/ClO<sub>2</sub> eljárás hatékonyabbnak bizonyult a trimetoprim, mint az 5-fluorouracil esetén, annak ClO<sub>2</sub>-al való közvetlen reakciója, valamint a klórtartalmú gyökökkel való reakciói miatt. Gyökfogók, valamint a reakciókörülmények változtatásának segítségével igyekeztünk ezeknek a modellvegyületek átalakulásában betöltött szerepét közelebbről megismerni.

Az UV/klór eljárások egyik hátránya a klórozott szerves termékek, valamint a klorátion képződése. Eredményeink alapján a kezelt oldatok toxicitásának változása a klórozott szerves vegyületek, valamint a klorátion képződéséhez egyaránt köthető. A mátrixként használt biológiailag kezelt szennyvíz jelentősen csökkentette a hatékonyságot, és kismértékben növelte a modellvegyületek átalakításához szükséges ClO<sub>2</sub> dózist, ami részben a mátrix szervesanyag tartalmához köthető, részben a szervetlen ionok gyökfogó hatásával értelmezhető.

A szerzők köszönik az Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) FK132742 számú OTKA pályázat támogatását. Farkas Luca köszöni a Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-3-SZTE-398 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Program támogatását.

## SZULFONIL-FLUORIDOK ALKALMAZÁSA A FRAGMENS-ALAPÚ GYÓGYSZERKUTATÁSBAN

**Csorba Noémi<sup>a,b</sup>, Petri László<sup>a</sup>, Ábrányi-Balogh Péter<sup>a,b</sup>, Keeley Aaron<sup>a</sup>, Simon József<sup>a,c</sup>,  
Randelović Ivan<sup>d</sup>, Tóvári József<sup>d</sup>, Schlosser Gitta<sup>e</sup>, Szabó Dániel<sup>f</sup>, Drahos László<sup>f</sup>,  
Keserű György Miklós<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt. 2.

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

<sup>c</sup> TTK MS Metabolomika Kutatólaboratórium, 1117 Budapest, Magyar Tudósok Krt. 2.

<sup>d</sup> Országos Onkológiai Intézet, Onkológiai Kutató Központ, Kísérletes Farmakológiai Osztály, 1122 Budapest, Ráth György u. 7-9.

<sup>e</sup> MTA-ELTE Lendület Ionmobilitás-Tömegspektrometria Kutatócsoport, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.

<sup>f</sup> TTK MS Proteomika Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt. 2.  
csorba.noemi@ttk.hu

Napjainkban a gyógyszerkémiai kutatásokban egyre nagyobb teret nyer a kovalensen kötődő hatóanyagok fejlesztése, ezzel lehetőséget biztosítva újfajta ligandum-kemotípusok, vagy akár új fehérjecélpontok azonosítására is.<sup>1</sup> A szulfonil-fluoridokról mint kovalens kötőelemekről ismert<sup>2</sup>, hogy körülményektől függően többféle nukleofil aminosavat is jelölhetnek, többek között tirozint, treonint, szerint, lizint, ciszteint és hisztidint, ezért bioaktív molekulákba beépítve hatékony eszközök lehetnek a fehérjecélpontok irreverzibilis módosítására. Ezáltal a SuFEx-kémia alkalmazása népszerű mind a kémiai biológia, mind a gyógyszerkémiai kutatásokban. Munkánk során<sup>3</sup> előállítottunk egy 20 tagú szulfonil-fluorid elektrofil kötőelemmel rendelkező molekulakönyvtárat, melyet fluoreszcencia alapú tirozin-reaktivitási, valamint korábbi munkáink<sup>4</sup> szerint végzett nonapeptid-alapú reaktivitási vizsgálatokkal jellemeztünk. A legjobb találatnak bizonyuló két molekulát a továbbiakban fehérje szinten a KRas-G12D onkoproteinnel szemben vizsgáltuk, amely számos rákos megbetegedéssel hozható összefüggésbe.<sup>5</sup> A vizsgált kovalens fragmensekről enzimatiszta fehérjeemésztést követő tömegspektrometriás mérések segítségével megállapítottuk, hogy azok minden esetben az Y157 tirozin aminosavat jelölik, amely a SOS–KRas fehérje-fehérje kölcsönhatási felület peremén található, és amelynek kovalens módosítását korábban még nem igazolták. Végül a KRas fehérjecélpontozhoz jól kötődő szerkezetű elektrofil-kötőelemet egy fluoreszcens vázra szereltük fel, és ezt a jelölővegyületet használtuk fel PANC-1 humán karcinóma sejtvonalból készült sejtlizátum jelölésére. A lizátumon végzett kovalens módosítás hatékonyságának igazolását SDS-PAGE és MS-proteomikai vizsgálatokkal végeztük el. Mind a PANC-1 sejtvonalon azonosított találatok mind a szulfonil-fluoridok gyógyszerkémiai kiindulópont-keresés során bemutatott alkalmazhatósága értékes kiindulópontjai lehetnek további terápiás és diagnosztikai fejlesztéseknek és hozzájárulhatnak a korai fázisú onkológiai programok sikerességéhez.

1. Juswinder Singh *J. Med. Chem.* **2022**, 65, 8, 5886–5901.
2. Arjun Narayanan, Lyn H. Jones, *Chem. Sci.*, **2015**, 6, 2650-2659
3. László Petri, Péter Ábrányi-Balogh, Noémi Csorba, Aaron Keeley, József Simon, Ivan Randelović, József Tóvári, Gitta Schlosser, Dániel Szabó, László Drahos, György M. Keserű; *Molecules* **2023**, 28, 7, 3042.
4. Péter Ábrányi-Balogh, László Petri, Tímea Imre, Péter Szijj, Andrea Scarpino, Martina Hrast, Ana Mitrović, György M. Keserű et al.; *Eur J Med Chem.* **2018**, 160, 94-107.
5. Dipesh Uprety, Alex A. Adjei; *Cancer Treatment Reviews* **2020**, 89, 102070.

## CSIPERKEGOMBA ALACSONY HŐMÉRSÉKLETŰ HŐKEZELÉSÉNEK VIZSGÁLATA

**Csutorás Csaba<sup>a</sup>, Bajzát Judit<sup>b</sup>, Sándorné Szőke Amanda<sup>b</sup>, Rác József<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Eszterházy Károly Katolikus Egyetem, 3300 Eger, Eszterházy tér 1.*

<sup>b</sup> *Magyar Gomba Kertész Kft., 3395 Demjén, 0173/7/A/1. Hrsz.*

*csutoras.csaba@uni-eszterhazy.hu*

Az élelmiszerek alacsony hőmérsékleten hosszabb ideig történő hőkezelése ismert technológia élelmiszerek előállítására, a *soux vide* technológia lényege, hogy lezárt lehetőleg levákuumozott hőálló műanyag tasakokban, alacsony hőmérsékleten, hosszabb ideig esetenként akár 50-70 óráig a hagyományos főzéshez képest lényegesen alacsonyabb hőfokon hőkezeljük az ételt. Gombák *soux vide* elkészítése természetesen ismert módszer az íz- aromaanyagokban gazdagabb készétel előállítására, kínai kutatók a hagyományos ételkészítési technológiákkal végeztek összehasonlítást<sup>1</sup>.

A gombák hőkezelés hatására történő átalakulásai csak kevésbé lettek feltárva az utóbbi években, a kísérleteinkben komplex módon vizsgáljuk a hőmérséklet és egyéb körülmények hatását csiperke- és egyéb egzotikus gombák esetében a Maillard reakció termékeire. Vizsgáljuk a fehérje-, poliszacharid- és vitamintartalom átalakulásait, valamint azonosítjuk az alacsony hőmérsékleten történő átalakulás főtermékeit, valamint a bioaktív komponenseket. A hőkezelés során egyrészt egy folyékony halmazállapotú, aromákban és bioaktív komponensekben gazdag tömény vizes kivonat keletkezik, melynek mennyiségét a körülmények változtatásával optimalizáltuk. A barnulási folyamatban másrészt keletkező magas fehérjetartalmú szilárd halmazállapotú élelmiszer alapanyag UV besugárzásával, emelt D-vitamin tartalmú gombaporokat is előállítottunk.

1. Sun Y, Lv F, Tian J, Ye XQ, Chen J, Sun P. Domestic cooking methods affect nutrient, phytochemicals, and flavor content in mushroom soup. *Food Sci Nutr.* **2019**, 15;7(6):1969-1975. doi: 10.1002/fsn3.996.

## GOMBATERMESZTÉSBEN ALKALMAZOTT TAKARÓANYAGOK FEJLESZTÉSE LETERMETT CSIPERKEGOMBA KOMPOSZT KOMPOSZTÁLÁSÁVAL

Misz András<sup>a</sup>, Bajzát Judit<sup>a</sup>, Sándorné Szőke Amanda<sup>a</sup>, Visnyei Marianna<sup>a</sup>, Allaga Henrietta<sup>b</sup>, Kredics László<sup>b</sup>, Vágvölgyi Csaba<sup>b</sup>, Csutorás Csaba<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Új Champignons Kft., 1224 Budapest, Bartók Béla út 162.

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar,  
Mikrobiológiai Tanszék, 6726 Szeged, Közép fasor 52.

<sup>c</sup> Eszterházy Károly Katolikus Egyetem, 3300 Eger, Eszterházy tér 1.  
csutoras.csaba@uni-eszterhazy.hu

A csiperkegomba (*Agaricus bisporus*) hatékony, gazdaságos termesztésének alapja a jó minőségű szaporítóanyag és gombakomposzt előállítása mellett természetesen a kiváló minőségű takaró föld biztosítása. A csiperkegomba micéliumával átszövetett gombakomposzt takarása történik meg a természetközeli házakban a takaróanyaggal, melynek szerepe elsősorban a termőtestek képződésének biztosításában, valamint a nagymértékű víztartó képességében rejlik. A tápanyagokban gazdag gombakomposzt alacsony víztartó képességű, így tulajdonképpen a magas víztartó képességű takaróanyag mintegy kiegészíti a komposzt ezen hiányosságát. Takaróanyagként a korábban alkalmazott kőport - mely nem adott megfelelő termőképességet - a világban mindenütt felváltották a különböző tőzegek, melyek jelentősen növelték a várható termésátlagokat.

A magyarországi és európai tőzgebányák kimerülése, valamint a tőzeg bányászatának környezeti problémái évek óta foglalkoztatják a kutatókat jó minőségű takaróanyag előállítására alkalmas alternatív lehetőségek kidolgozására. A mindezidáig könnyen hozzáférhető, olcsó tőzeg takaróanyag rendelkezésre állása miatt a kutatások lassan haladtak, azonban a fenti okokból jelentős igény mutatkozik a gombatermesztéssel foglalkozó vállalkozások részéről új, stabilabb termőképességet biztosító takaróanyagok kifejlesztésére<sup>1,2</sup>.

Vizsgálatainkban célul tűztük ki egy olyan, kiváló vízmege tartó képességű takaró föld előállítására szolgáló innovatív technológia kifejlesztését a csiperke termesztés céljára, mely a letermett gombakomposzt mikrobiális irányított rekomposztálása révén valósul meg. Kísérleteink során elsőként felmértük a letermett komposzt természetes újrakomposztálódási folyamata során lezajló fizikai, kémiai és mikrobiológiai változásokat, melynek során kidolgoztunk egy alapanyagok és kész takaróanyagok kémiai analitikai és mikrobiológiai változásainak nyomonkövetésére szolgáló monitoring módszert.

A munka egyrészt az Új Champignons Kft. és a Szegedi Tudományegyetem 2020-1.1.2-PIACI-KFI projektje keretében, másrészt az Innovációs és Technológiai Minisztérium KDP-2021 kódszámú Kooperatív Doktori Program Doktori Hallgatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

1. Ashrafi, R.; Mian, M.; Rahman, M.; Jahiruddin, M. Reuse of Spent Mushroom Substrate As Casing Material for the Production of Milky White Mushroom. *J Bangladesh Agric Univ* **2017**, *15*, 239-247.
2. Riahi, H., Vahid Afagh, H. and Sheidai, M. The first report of spent mushroom compost (smc) leaching from iran. *Acta Hort.* **1998**, *469*, 473-480.

## LIPOFIL, CINKONAALAPÚ ORGANOKATALIZÁTOR ALKALMAZÁSA ÉS VISSZAFORGATÁSA A BAKLOFEN SZINTÉZISÉBEN

**Dargó Gyula, Erdélyi Dóra, Molnár Balázs, Bagi Péter, Kisszékelyi Péter, Kupai József**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp 3.  
gyula.dargo@edu.bme.hu*

Napjainkban kiemelkedő jelentősége van a katalitikus folyamatoknak, és ezen belül is előtérbe kerül az aszimmetrikus organokatalizátorok alkalmazása, amelyek jelentős áttörést jelentettek az aszimmetrikus szintézisek megvalósításában. Ennek köszönhetően 2021-ben a kémiai Nobel-díjat az aszimmetrikus organokatalízis felfedezéséért ítélték oda.<sup>1</sup> Bár az organokatalizátorok alkalmazásának előnye kétségtelen, szintézisük gyakran hosszú és költséges folyamat. Ebből kifolyólag mind gazdaságossági, mind környezetvédelmi szempontból visszaforgatásuk és újrafelhasználásuk kiemelkedően fontos. Ennek megvalósítására számos fáziszeparáción alapuló módszer ismert a szakirodalomban.<sup>2</sup> Ilyen például a katalizátor szilárd hordozóhoz történő rögzítése, a méretkülönbségen alapuló nanomembránszűrés, valamint a katalizátor és a reakcióelegy komponensei közötti oldhatósági különbségek kihasználása. Munkám során ez utóbbi visszaforgatási módszert választottam.

A katalizátor visszaforgatásához egy lipofil oldalláncot<sup>3</sup> alakítottam ki a katalizátoron, amely segítségével jelentős polaritáskülönbség érhető el a katalizátor és a reakcióelegy egyéb komponensei között. A lipofil egység növeli az organokatalizátor oldhatóságát a kevésbé poláris szerves oldószerekben, mint például a diklórmétán és a toluol. Ezzel szemben poláris oldószerekben – beleértve a metanolt és az acetonitrilt – a katalizátor kicsapódásához vezet. Ennek eredményeként az oldószercserét követően a visszaforgatás egy egyszerű lépésben, centrifugálással vagy szűréssel megvalósítható.

Az így kapott lipofil organokatalizátort a simaizom-göresoldó baklofen gyógyszerhatóanyag királis intermedierjének a szintézise során alkalmaztam. Az aszimmetrikus *Michael*-addícióban *transz*-4-klór- $\beta$ -nitrosztiroil és egy spirokötéssel ciklohexángyűrűt tartalmazó *Meldrum*-savat<sup>4</sup> alkalmaztam. A reakcióban kiváló termelés (96–100%) és enantiomerfelesleg (93–94% ee) elérése mellett kaptam a baklofen intermedierjét. Ezt követően a katalizátor visszaforgatását oldószercsere segítségével valósítottam meg, és további öt reakcióciklusban alkalmaztam. A visszaforgatás során a katalitikus aktivitás és az enantioszelektivitás szignifikáns változása nélkül, minimális katalizátorvesztéssel tapasztaltam.

1. Castelvechchi, D.; Stoye, E. *Nature* **2021**, 598, 247.

2. Fulgheri, T.; Penna, F. D.; Baschieri, A.; Carlone, A. *Curr. Opin. Green Sustain. Chem.* **2020**, 25, 100387.

3. Jichu, T.; Inokuma, T.; Aihara, K.; Kohiki, T.; Nishida, K.; Shigenaga, A.; Yamada, K.-I.; Otaka, A. *ChemCatChem* **2018**, 10, 3402–3405.

4. Kimmel, K. L.; Weaver, J. D.; Ellman, J. A. *Chem. Sci.* **2012**, 3, 121.

**A Kulturális és Innovációs Minisztérium ÚNKP-22-3-I-BME-125 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap (OTKA-FK 138037), valamint a Richter Gedeon Táler Alapítvány anyagi támogatásával készült.**

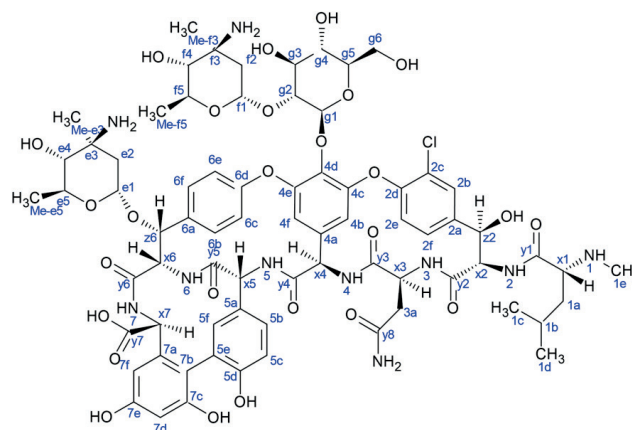
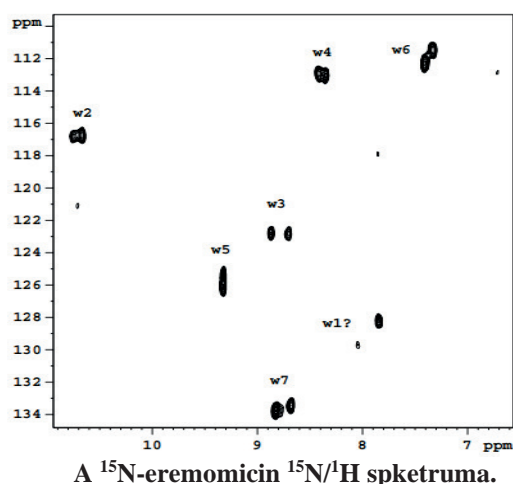
## A GLIKOPEPTID ANTIBIOTIKUMOK SZERKEZETE ÉS HATÁSMECHANIZMUSA: AZ EREMOMICIN ÉS AZ ORITAVANCIN NMR VIZSGÁLATAI

**Erdei Réka Pálma, Izsépi László, Batta Gyula**

*Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.  
erdei.reka@scinence.unideb.hu*

Az antibiotikum-rezisztencia világszerte súlyos közegészségügyi problémaként jelenik meg. Ezért új glikopeptid antibiotikumok<sup>1</sup> fejlesztésére van szükség. Az oritavancin egy félszintetikus klór-eremomicin származék, amelyet az FDA jóváhagyott a Gram-pozitív baktériumok, köztük a *meticillin*-rezisztens *Staphylococcus aureus* (MRSA) ellen. A glikopeptid antibiotikumok szerkezetének és hatásmódjának vizsgálatát gyakran <sup>1</sup>H és <sup>13</sup>C NMR technikák támsztják alá. A jelen munkában bemutatjuk, hogy az eremomicin <sup>15</sup>N jelölése új utat nyit az NMR-vizsgálatok számára.

Igazoljuk, hogy a <sup>15</sup>N relaxációs (T<sub>1</sub>, T<sub>2</sub>, NOE) mérések betekintést engednek az NH-csoportok belső dinamikájába<sup>2</sup>. Az ugyanezen adatsorból származó globális korrelációs idők bizonyítják, hogy az N-Ac-D-Ala-D-Ala<sup>3</sup> sejtfa analóg peptid eremomicinhez adásával eremomicin tetramerek és oktamerek indukálódnak a ligandum távollétében megjelenő dimerekből. A diffúziós NMR módszer (DOSY) ugyanerre az eredményre vezetett. Az oritavancin vizes oldatban stabil, aszimmetrikus dimereket képez, azonban a dipeptid ligandum hozzáadása kicsapódást okoz, ami magasabb oligomerizációs állapotra utalhat.



1. S. Soloveva, S. Printsevskaja, E. Olsuf'eva, G. Batta, és M. Preobrazhenskaya, „New Derivatives of Eremomycin Containing N-15 or F Atoms for NMR Study”, *Bioorg. Khim.*, köt. 34, o. 831–9, 0 2008, doi: 10.1134/S1068162008060162.
2. N. Tjandra, A. Szabo, és A. Bax, „Protein Backbone Dynamics and <sup>15</sup>N Chemical Shift Anisotropy from Quantitative Measurement of Relaxation Interference Effects”, *J. Am. Chem. Soc.*, köt. 118, sz. 29, o. 6986–6991, jan. 1996, doi: 10.1021/ja960510m.
3. L. Izsépi és mtsai., „Bacterial Cell Wall Analogue Peptides Control the Oligomeric States and Activity of the Glycopeptide Antibiotic Eremomycin: Solution NMR and Antimicrobial Studies”, *Pharm. Basel Switz.*, köt. 14, sz. 2, o. 83, jan. 2021, doi: 10.3390/ph14020083.

## AZ ÖSSZEFÜZÖTT NMR KÍSÉRLETEK ALKALMAZHATÓSÁGI ELŐNYEI: A NORD (NO RELAXATION DELAY) SPEKTROSKÓPIA

**Farkas László Bence<sup>a,b\*</sup>, Timári István<sup>c</sup>, Nagy Tamás Milán<sup>a,d</sup>,  
Erdődiné Kövér Katalin<sup>a,b</sup>, Sørensen Ole Winneche<sup>e</sup>**

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

<sup>b</sup>ELKH-DE, Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport,  
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>c</sup>Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>d</sup>Umeåi Egyetem, Kémiai Tanszék, Umeå, Svédország

<sup>e</sup>Koppenhága, Dánia

\*e-mail: farkas.laszlo.bence@science.unideb.hu

A szerves vegyületek oldatfázisú szerkezetvizsgálatában mai napig fontos sarokkö az NMR spektroszkópia. A kis és közepes molekulák szerkezetazonosítását homonukleáris ( $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ ) és heteronukleáris ( $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ) egy-, illetve többkötéses korrelációs NMR kísérletek alapján végezzük.

Az NMR limitált érzékenysége miatt az impulzusprogramot többször meg kell ismételnünk ahhoz, hogy egy-egy kísérlet eredményeül kapott NMR spektrum megfelelő jel/zaj aránnyal rendelkezzen. A hagyományos mérések esetében a rendelkezésre álló mágnesszettség minden egyes körben kimerül, így várakozási időt kell beiktatni az ismétlődő impulzusprogram között, hogy a relaxáció során visszaálljon az egyensúlyi mágnesszettségi állapot. A kísérletekben kiadott impulzusok tipikusan nagyon rövid, mikroszekundum nagyságrendűek, azonban a csatolási állandók és a kémiai eltolódások milliszekundumos evolúciója és a detektálás néhány tized másodperce mellett a várakozási (relaxációs) idő több másodpercet is igénybe vehet. Ez a hagyományos NMR mérések idejét jelentősen befolyásolja, noha ezen holtidő alatt hasznos információt nem kapunk.

A kutatócsoportunk által kifejlesztett NORD szuperszekvenciák<sup>1,2,3</sup> a kísérletsorozatok szünet nélküli lefuttatását teszik lehetővé oly módon, hogy a különböző mágnesszettségi tartályokat hatékonyan használják a beépített szelektív impulzusoknak köszönhetően. Továbbá a mágnesszettség részleges, Ernst-szöggel<sup>4</sup> való gerjesztésének előnyeit is alkalmazva az egyik kísérlet futási ideje alatt az éppen kihasználatlan mágnesszettségi komponens relaxációja megy végbe.

Előadásomban néhány példán keresztül szeretném bemutatni, hogy ezen összefűzött NMR kísérletek milyen alkalmazhatósági előnyökkel rendelkeznek a hagyományos, egymás után indított kísérletekhez képest.

1. T. M. Nagy, K. E. Kövér, Sørensen O. W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 13587.

2. I. Timári, T. M. Nagy, K. E. Kövér, O. W. Sørensen, *Chem. Commun.* **2022**, 58, 2516.

3. L. B. Farkas, I. Timári, K.E. Kövér, O.W. Sørensen, *J. Magn. Reson.* **2022**, 34, 107297.

4. R. R. Ernst, W. Anderson, *Rev. Sci. Instrum.* **1966**, 37, 93-102.

## SPIRO SZÁRMAZÉKOK ENANTIOSZELEKTÍV SZINTÉZISE ÁTMENETIFÉM KATALIZÁLT REAKCIÓK FELHASZNÁLÁSÁVAL

**Galgóczy Gréta, Paczal Attila, Kotschy András**

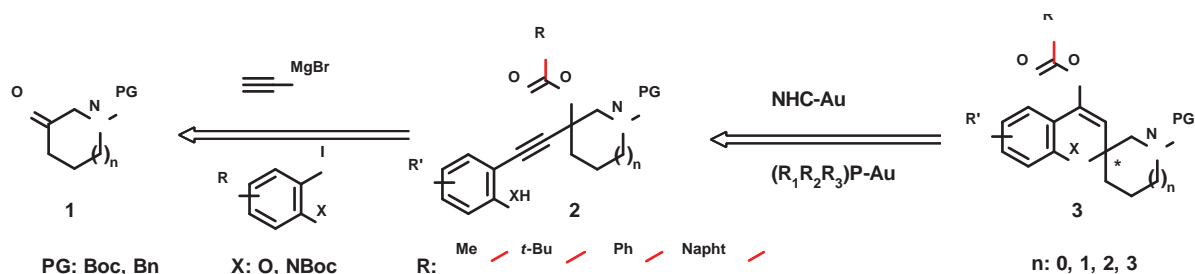
*Servier Kutatóintézet Zrt., 1031 Budapest, Záhony utca 7.  
greta.galgoczy.part@servier.com*

A gyógyszercegek sikere nagyrészen függ a felfedező kutatás időtartamának lerövidítésétől. Ez jórészt a nagyszámú és szerkezetileg sokszínű vegyülettárak tesztelésével érhető el. A Servier-n belül is fontos fejlődési irány molekulabankjának bővítése.

Gyógyszerkémiai szempontból fontosak az olyan szintetikus kutatások, amelyek alapvázukban az  $sp^3$ -as centrumok beépítését célozzák meg, így a teret mindhárom irányban egyenletesebben töltik ki.<sup>[1]</sup> Ide sorolhatjuk a spiro származékokat, melyeknek szintézise sokszor nagyon bonyolult és költséges.

A fentiek fényében, doktori kutatásaim fő célkitűzése, olyan királis spiro származékok szintézise, amelyek a kismolekulás gyógyszerkutatás hasznos kiindulási fragmensei lehetnek. A molekuláink előállításánál, már kezdetben, figyelünk az anyagok gyógyszeryszerűségére, illetve a molekula továbbépíthetőségére. Az előállított vegyületek bekerülnek a Servier molekula-könyvtárába.

A spiro származékok szintéziséhez, az általunk előállított,<sup>[2]</sup> NHC-Arany-, és a kereskedelemben elérhető foszfán-Au-komplexeket használjuk az **1. ábrán** feltüntetett modellreakciókban.<sup>[3]</sup> Fontos szempont volt, hogy olcsó kiindulási anyagokból kiindulva komplex vázakat tudjunk előállítani.



**1.ábra** A királis spiro származékok előállításának retroszintetikus útvonala

[1] Cs., Sepsey Für, H., Bölcseki *Chemistry* **2020**, *2*, 837–848.

[2] Z. Szabo, M. Timari, R. Kassai, B. Szokol, A. C. Benyei, T. Gáti, A. Paczal, and A. Kotschy, *Organometallics*, **2020**, *39*, 3572–3589.

[3] Y.-M. Sun, P. Gu, M. Shi *Chemical Communications* **2020**, *52*, 6942–6945.

## ARALKIL SZELENOGLIKOZIDOK ÉS MÓDOSÍTOTT TIODIGALAKTOZIDOK ELŐÁLLÍTÁSA

**Hogye Fanni, Illyés Tünde Zita, Szilágyi László**

*Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Szerves Kémiai Tanszék,  
4032, Debrecen Egyetem tér 1., tel.: (06-52) 512-900/22470,  
fax: (06-52) 512-744,  
e-mail: [hogye.fanni@szcience.unideb.hu](mailto:hogye.fanni@szcience.unideb.hu)*

Az állati és humán sejt felszín fontos komponensei a glikán makromolekulák, melyek fiziológiai felismerési folyamatban alapvető szerepet játszanak. Ezen folyamatok hátterében rendszerint fehérje-glikán kölcsönhatások állnak. A lektinek változatos szerkezetű és funkciójú, szénhidrát felismerő fehérjék; felelősek az intracelluláris jelátvitelért, a sejt-sejt vagy sejt-extracelluláris mátrix kölcsönhatásokért. Az irodalomban számos olyan szénhidrát-származék ismert, melyekben a glikozidos oxigén atom helyett kén és/vagy szelén heteroatomok szerepelnek; az új típusú glikozidos kötések tartalmazó származékok különféle biológiai aktivitással rendelkeznek.

Egyes diglikozil-diszelenidek jó hatékonysággal gátolják az afrikai álomkórt okozó *Trypanosoma brucei* parazita szaporodását; bivalens (tio- és szeleno) glikozilezett benzol és naftalin származékok VAA növényi lektinhez kötődnek.<sup>1</sup> Kutatócsoportunkban kimutatták, hogy 1,2,3-triazol gyűrűs tio- és szelenoglikozidok PA-IL<sup>2</sup> bakteriális lektinhez kötődnek, különböző aralkil tiodigalaktózidok humán galektin-3 (*hGal-3*) lektinhez történő kötődési vizsgálatait folyamatban vannak.

Munkánk célkitűzése új típusú, változatos szerkezetű szelenogalaktózid származékok előállítása, különböző lektin kötődési valamint parazita ellenes vizsgálatok céljából.

2-(brómtil)naftalint, 2-(brómtil)kinolint, 4-(brómtil)-7-metoxikumarint 2,3,4,6-tetra-O-acetil- $\beta$ -D-galaktopiranozil-izoszelenourónium sóval reagáltatva, új szelenogalaktózidokat állítottunk elő jó hozamokkal. A propinil 2,3,4,6-tetra-O-acetil- $\beta$ -D-szelenogalaktopiranozidot 2-(azidometil) aromás származékokkal Cu(I) katalizált 1,3-dipoláris cikloaddíciós reakcióban 1,2,3-triazol gyűrűs szelenogalaktózidokká alakítottuk. Az új származékok PA-IL bakteriális lektinhez történő kötődését valamint parazita ellenes vizsgálatokban kívánjuk tesztelni.

A humán galektin-3 (*hGal-3*) lektinhez jó affinitással kötődnek különböző 3,3'-diaralkil-tiodigalaktózid (TDG) származékok. A TDG 3,3'-helyzetében történő módosítását 2-(brómtil)kinolinnal valamint monofunkciós bimán származékokkal elvégezve két újszármazék állítható elő, melyeknek *hGal-3* lektinhez történő kötődését vizsgáljuk.

1. Kaltner H., Szabó T., Fehér K., André S., Balla S., Manning J. C., Szilágyi L., Gabius H-J. *Bioorg. Med. Chem.* **2017**, *25*, 3158–3170.

2. Illyés T. Z., Malinovská L., Róth E., Tóth B., Farkas B., Korsák M., Wimmerová M., E. Kövér K. and Csávás M. *Molecules* **2021**, *26*, 542

## MIKROHULLÁMÚ KÖRÜLMÉNYEK KÖZÖTT VÉGBEMENŐ PALLÁDIUM-, NIKKEL- ÉS RÉZKATALIZÁLT P–C KAPCSOLÁSI REAKCIÓK ÖSSZEHASONLÍTÁSA

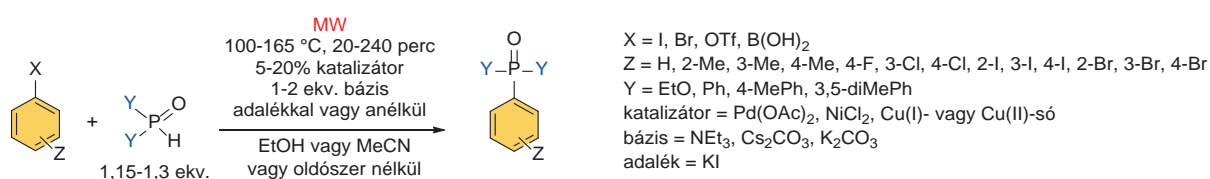
**Huszár Bianka<sup>a</sup>, Mucsi Zoltán<sup>b</sup>, Szolga Renáta<sup>a</sup>, Szűcs Nóra Ágnes<sup>a</sup>, Keglevich György<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,  
1111 Budapest, Budafoki út 8.*

<sup>b</sup>*Miskolci Egyetem, Anyag- és Vegyészmérnöki Kar, 3515 Miskolc-Egyetemváros  
huszar.bianka@vbk.bme.hu*

A P–C keresztkapcsolási reakciók úttörőjének számító *Hirao* vinil- és arilfoszfonátok előállítására dolgozott ki egy új módszert.<sup>1</sup> A palládiumtetrakisz-trifenilfoszfin [(Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>)] által katalizált reakciókat később tercier foszfin-oxidok szintézisére is kiterjesztették, azonban ezekben az esetekben már sokkal inkább palládium-, illetve nikkel-sókat, valamint különféle P-ligandumokat alkalmaztak.<sup>2</sup>

A Műegyetemen foszforkémiával foglalkozó kutatócsoportunk már évek óta foglalkozik a *Hirao*-kapcsolás vizsgálatával, egyszerűbbé és környezetbarátabbá tételével. Eddigi kutatásaink során sikerült olyan Pd(OAc)<sub>2</sub>, NiCl<sub>2</sub>, Cu(I)- és Cu(II)-sók által katalizált megvalósításokat kidolgozni, melyekkel MW-körülmények között a hagyományos egy- és kétfogú foszfin-, illetve N-tartalmú ligandumok hozzáadása nélkül is megvalósíthatók a kapcsolások, akár oldószer hozzáadása nélkül.<sup>3-11</sup> Munkánk során elsősorban aril-halogenidek és >P(O)H-reagensek reakcióját tanulmányoztuk, de vizsgáltuk dihalogénezett benzolszármazékok átalakítását<sup>12</sup>, továbbá halogén helyett más távozócsoportot tartalmazó aril-vegyületek reakcióba vitelét (pl. -OTf<sup>9</sup>, -B(OH)<sub>2</sub>) is. Kísérleti eredményeink mindhárom említett átmenetifém esetén *Dr. Mucsi Zoltánnak* köszönhetően kvantumkémiai számításokkal is kiegészültek, feltérképezve ezzel a reakciók részletes mechanizmusát.<sup>4,6,7,8,10,11</sup> Továbbá brómbenzol és difenilfoszfin-oxid Pd(OAc)<sub>2</sub>-katalizálta kapcsolása során egy *ún.* indukciós periódus jelenlétét is megfigyeltük.<sup>9</sup>



1. Hirao, T., Masunaga, T., Ohshiro, Y., Agawa, T., *Tetrahedron Lett.*, **1980**, 21, 3595.
2. Henyecz, R., Keglevich, G., *Curr. Org. Synth.*, **2019**, 16, 523.
3. Keglevich, G., Jablonkai, E., Balázs, L. B., *RSC Adv.*, **2014**, 4, 22808.
4. Keglevich, G., Henyecz, R., Mucsi, Z., Kiss, N. Z., *Adv. Synth. Catal.*, **2017**, 359, 4322.
5. Jablonkai, E., Balázs, L. B., Keglevich, G., *Curr. Org. Chem.*, **2015**, 19, 197.
6. Henyecz, R., Mucsi, Z., Keglevich, G., *Pure Appl. Chem.*, **2019**, 91, 121.
7. Henyecz, R., Mucsi, Z., Keglevich, G., *Pure Appl. Chem.*, **2020**, 92, 493.
8. Keglevich, G., Henyecz, R., Mucsi, Z., *J. Org. Chem.*, **2020**, 85, 14486.
9. Henyecz, R., Huszár, B., Grenitzer, V., Keglevich, G., *Curr. Org. Chem.*, **2020**, 24, 1048.
10. Huszár, B., Henyecz, R., Mucsi, Z., Keglevich, G., *Catalysts*, **2021**, 11, 933.
11. Huszár, B., Szolga, R., Mucsi, Z., Keglevich, G., *J. Organomet. Chem.*, **2022**, 982, 122526.
12. Huszár, B., Szűcs, N. Á., Varga, P. R., Drahos, L., Keglevich, G., *Catalysts*, **2022**, 12, 1080.

## AROMÁS NITROVEGYÜLETEK KATALITIKUS HIDROGÉNEZÉSÉRE ALKALMAS KATALIZÁTOROK FEJLESZTÉSE AZ IPARBAN

**Jakab-Nácsa Alexandra<sup>a</sup>, Tamás Bence Benedek<sup>a</sup>, Vanyorek László<sup>b</sup>, Viskolcz Béla<sup>b</sup>,  
Farkas László<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> BorsodChem Zrt., Technológiai Támogatás, 3700, Kazincbarcika, Bolyai tér 1.

<sup>b</sup> Kémiai Intézet, Miskolci Egyetem Anyag-és Vegyészmérnöki Kar, 3515 Miskolc-  
Egyetemváros

*alexandra.nacsa@borsodchem.eu*

A 2021. októberében indult, az NKFI Alapból finanszírozott, a BorsodChem Zrt. és a Miskolci Egyetem közreműködésével induló „Aromás izocianátok alapanyag gyártásának komplex, integrált technológiai fejlesztése” kutatás-fejlesztési projekt célja a piaci körülményekhez és a környezetvédelmi előírásokhoz igazodó, hangolható, intelligens hidrogénező katalizátor rendszer fejlesztése, melynek köszönhetően növelhető a katalitikus technológiai folyamat hatékonysága.

A BorsodChem Zrt. Az „ARIZO” rövidítésű projekt keretén belül az aromás nitrovegyületek, köztük a 2,4-dinitrotoluol és a nitrobenzol, hidrogénezésére alkalmas katalizátor rendszer fejlesztésére irányuló alkalmazott kutatási folyamatot indított el. A kutatás elsődleges célja, hogy a tudományos alapokon nyugvó legújabb kutatási eredmények eljuthassanak az ipari alkalmazásig a két konzorciumi tag szoros együttműködésével.

A konferenciára készült anyag a katalizátor fejlesztés egyes részfolyamatainak kutatási előrehaladását kívánja bemutatni, kihangsúlyozva a katalizátor laboratóriumi körülmények között történő előállítási folyamatát, valamint a katalizátor összetétel vizsgálatát.

A 2020-1.1.2-PIACI-KFI-2020-00121 azonosítószámú projekt az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával valósul meg.

## IPARI SZÜRKEVÍZ VISSZAFORGATÁSI LEHETŐSÉGEK VIZSGÁLATA A LIFE PROJEKT KERETÉN BELÜL

**Jakab-Nácsa Alexandra<sup>a</sup>, Korbács Ákos<sup>a</sup>, Harnócz Lilla<sup>a</sup>,  
Viskolcz Béla<sup>b</sup>, Farkas László<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> BorsodChem Zrt., Technológiai Támogatás, 3700, Kazincbarcika, Bolyai tér 1.

<sup>b</sup> Kémiai Intézet, Miskolci Egyetem Anyag-és Vegyészmérnöki Kar,

3515 Miskolc- Egyetemváros

[alexandra.nacsa@borsodchem.eu](mailto:alexandra.nacsa@borsodchem.eu)

A következő évtizedek legnagyobb kihívása az emberiség számára a globális klímaváltozás. Az ezzel összefüggő negatív hatások jelentős földrajzi szórást mutatnak, így kezelésének leghatékonyabb módja a helyi közösségek szintjén történő klímaadaptációs eljárások kidolgozása és megvalósítása. A lokális szinten megvalósuló intézkedések eredményeként a növekvő alkalmazkodóképesség elősegíti az éghajlatváltozás okozta sérülékenység csökkentését.

A 2020 szeptemberében indult LIFE19 CCA/HU/00132 azonosítószámú, „LIFE CLIMCOOP – Városok és helyi vállalatok együttműködése az éghajlati alkalmazkodásért” elnevezésű projekt az Európai Unió LIFE programjának támogatásával, valamint az Innovációs és Technológiai Minisztérium társfinanszírozásával valósul meg. A különböző eredetű szürkevizek (ipari szennyvíz, települési csapadékvíz, kezelt települési szennyvíz) újrafelhasználására, illetve a BorsodChem Zrt. vízfelhasználásának optimalizálására kifejlesztésre került egy prototípus berendezés, amely hosszú távon, a projekt időszak során kipróbált megoldások nagyléptékű alkalmazásával elősegíti a Sajóból ipari célokra történő vízkivétel csökkentését is.

A prezentált anyag az elkészült prototípus működtetésével kapcsolatos előrehaladásokat és tapasztalatokat gyűjti össze, a megvalósíthatóságot mérési eredményekkel alátámasztva egy ipari szürkevíz tisztítási példáján keresztül.

## SOURCE IDENTIFICATION OF VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS AND ALDEHYDES IN ITALIAN RESTAURANT KITCHENS

**Marta Keller<sup>a</sup>, Davide Campagnolo<sup>a</sup>, Andrea Cattaneo<sup>a</sup>, Cristina Boldorini<sup>a</sup>, Nani Apriyani<sup>b</sup>, Francesca Borghi<sup>a</sup>, Giacomo Fanti<sup>a</sup>, Sabrina Rovelli<sup>a</sup>, Andrea Spinazzè<sup>a</sup>, Carolina Zellino<sup>a</sup>, Victor G. Mihucz<sup>c</sup>, Carlo Dossi<sup>d</sup>, Domenico Maria Cavallo<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Department of Science and High Technology, University of Insubria, Via Valleggio 11, 22100 Como, Italy*

<sup>b</sup> *Department of Pharmacognosy, Semmelweis University, Üllői út 26, 1085 Budapest, Hungary*

<sup>c</sup> *Institute of Chemistry, ELTE - Eötvös Loránd University, Pázmány Péter sétány 1/A, 1117 Budapest, Hungary*

<sup>d</sup> *Department of Theoretical and Applied Science, University of Insubria, via J.H. Dunant 3, 21100 Varese, Italy  
mkeller@uninsubria.it*

Kitchen activities such as cooking and cleaning dishes, can lead to non-negligible emissions of various pollutants<sup>1,2</sup>. Nevertheless, less evidence is available on pollutant concentrations in restaurant kitchens<sup>1</sup>. For this, a study project dedicated to air quality in restaurant kitchens has been conducted. The aim of this work was to identify the sources of volatile organic compounds (VOCs) and aldehydes through Principal Component Analysis (PCA) on a database of 15 restaurants located in the northern part of Italy. For each restaurant, two monitoring and sampling campaigns (winter and summer) were carried out to determine the levels of different contaminants. A database containing VOCs, aldehydes and ozone (O<sub>3</sub>) concentration data was created for each monitoring campaign. Several data treatment steps have been implemented. First, values below the limit of quantification (LOQ) were estimated according to the “Maximum Likelihood Estimation” (MLE) method<sup>4</sup>. Compounds with more than 50% of values below the LOQ were excluded from the analysis. Then, the concentration data for each individual pollutant were transformed into natural logs. Finally, the PCA (Varimax rotation) was performed on the resulting data matrices. For both campaigns, the analysis identified five factors that were evaluated to estimate the sources of VOCs, aldehydes and O<sub>3</sub>. It was demonstrated that ozone-initiated reactions played a major role in summer, *cf.* ozonolysis reactions. Sources linked to the cooking activities and cleaning products have been identified in both seasons. Furthermore, in winter the BTX [Benzene, Toluene and (o-, m-, p-) Xylenes] fraction would seem to derive from cooking activities. On the contrary, in summer they are probably linked to external sources, typically to vehicular traffic. This study revealed that, in restaurant kitchens, the sources linked to cooking activities were more important in winter than in summer. This could be related to the fact that, in the hot season, the ventilation rate (opening windows) is higher.

1. Loomans, M.; Te Kulve, M.; Boerstra, A. *Indoor Air 2020 (Virtual)* **2020C**, Online1

2. Rovelli, S.; Cattaneo, A.; Fazio, A.; Spinazzè, A.; Borghi, F.; Campagnolo, D.; Dossi, C.; Cavallo, D.M. *Atmosphere* **2019**, *10*, 1.

3. Helsel, D. R. *Chemosphere* **2006**, *65*, 2434.

## DROP COATING DEPOSITION RAMAN SPECTROSCOPY OF LIPOSOMES

Alžbeta Kuižová<sup>a</sup>, Anna Kuzminova<sup>b</sup>, Ondřej Kylián<sup>b</sup>, Eva Kočíšová<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Institute of Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Ke Karlovu 5, 121 16 Prague 2, Czech Republic*

<sup>b</sup> *Department of Macromolecular Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague 8, Czech Republic*  
*Email of presenting author: [kuzizova@karlov.mff.cuni.cz](mailto:kuzizova@karlov.mff.cuni.cz)*

Raman spectroscopy represents a widely used analytical spectroscopic technique providing unique information about the vibrational motion of molecules. In the Raman study of biological molecules and their interaction including biomembrane models, markers or probes that could have undesirable effects are not needed. The applicability of the conventional Raman spectroscopy to liquid samples is generally limited by a weak Raman scattering cross-section to the highly concentrated samples. This can be overcome by drop coating deposition Raman Spectroscopy (DCDRS) which is based on the drying of a small deposited droplet of liquid sample on the hydrophobic substrate. Evaporation of solvent from droplet leads to the preconcentration of a studied analyte into dried pattern from which normal Raman spectra of high quality can be acquired. The sensitivity of the spectra and the form of dried patterns are influenced not only by the properties of the solution but also depends on the substrate characteristic such as wettability and roughness that governs the droplet drying dynamics.<sup>1</sup>

We focused our attention on the spherical membrane structures, liposomes, which are often used as real membrane models. Liposome suspensions, dried on smooth and nanostructured hydrophobic substrates with different roughness, were studied by DCDRS. Evaporation of solvent from droplets of liposome suspension led to the accumulation of solute in the ring-shaped pattern. Used substrates were prepared by a method based on the deposition of arrays of nanoparticles (Cu or Ag) fusing a gas aggregation source and subsequent overcoating these substrates by sputter-deposited thin C:F film. The nanoroughness and with it connected wettability of produced coatings is controlled by the number of nanoparticles in the base layer including an option of a gradient surface coverage. It was shown that in the case of liposome suspension, the nanoroughness leads to stronger preconcentration as well as to the reduction of the ring diameter, i.e. two parameters crucial for the DCDR measurements.<sup>2,3</sup>

1. Kuižová, A.; Kočíšová, E. *J. Raman Spectrosc.* **2023**, *1*, <https://doi.org/10.1002/jrs.6524>
2. Kuižová, A.; Kuzminova, A.; Kylián, O.; Kočíšová, E. *Polymers* **2021**, *13*, 4023, <https://doi.org/10.3390/polym13224023>
3. Kočíšová, E.; Procházka, M. *J. Raman Spectrosc.* **2011**, *42*, 1606, <https://doi.org/10.1002/jrs.2915>

## OPTIKAI HULLÁMVEZETŐ FÉNYMÓDUS SPEKTROSKÓPIA (OWLS) ALAPÚ MÓDSZER FEJLESZTÉSE A GLYPHOSATE GYOMIRTÓSZER-HATÓANYAG MEGHATÁROZÁSÁRA

Majerné Baranyi Krisztina<sup>a</sup>, Székács András<sup>b</sup>, Adányiné Kisbocskói Nóra<sup>a</sup>

<sup>a</sup> MATE, ÉTTI, Élelmiszertudományi kutatócsoport, 1118 Budapest, Villányi út 29-43.

<sup>b</sup> MATE, KÖTI, Agrár-környezettudományi Kutatóközpont, 1022 Budapest, Herman Ottó út 15.

A *glyphosate* hatóanyag az 1974-es bevezetése óta világszerte piacvezető gyomirtóvá vált. Az évente felhasznált mennyiség folyamatosan növekszik, főként a géntechnológiai úton módosított (GM) *glyphosate*-tűrő növények elterjedése óta. Egy 2019-ben indított felmérés szerint a *glyphosate* értékesítését 2017-ben még az EU-ban is, ahol nincsen *glyphosate*-tűrő GM növény köztermesztésben, 46 527 tonnára becsülték, ami az EU-ban eladott teljes gyomirtószer-eladás 33%-át tette ki. Napjainkra az egész világon a felhasználás eléri vagy akár meg is haladja az évi egy megatonnát, ami súlyos környezetterhelést jelent. A *glyphosate* hatóanyagot totális gyomirtóként használják mind a növénytermesztésben (gyomirtásra a kultúrnövény vetése előtt, *glyphosate*-tűrő transzgenikus növények esetén a vetés után is, állományszárításra), mind ipari területeken, de városi gyomirtásra is. Az IARC az emberre valószínűleg rákkeltő kategóriába sorolta, bár megítélése sok vitát váltott ki. A *glyphosate* illetve származékai nem csak közvetlen szennyezett alapanyag elfogyasztásával kerülhet szervezetünkbe, hanem a szennyezett takarmánnyal etetett állatok elfogyasztásával közvetlenül is. Számos ehető rovar pl. lisztkukac (amit alternatív fehérjeforrásként használnak takarmányban, illetve egyes országokban emberi fogyasztásra) előállításához használt alapanyag (búza, árpa, rozs) *glyphosate*-tal szennyezett lehet, így megjelenve a táplálékláncban és bejutva a szervezetbe számos egészségügyi veszélyt jelent, ezért kiemelkedően fontos olyan analitikai módszerek fejlesztése, amelyek a *glyphosate* egyszerű, gyors, megfelelő érzékenységgel meghatározását teszik lehetővé.

Kísérleteinkben *glyphosate* meghatározására alkalmas OWLS alapú immunszenzor fejlesztését tűztük ki célul. Vizsgáltuk a direkt, illetve a kompetitív mérési módszer alkalmazhatóságát. Direkt mérési módszer esetén az amino-szilanizált szenzor felületén 2.5 µg/mL *glyphosate*-specifikus antitestet rögzítettünk, és közvetlenül vizsgáltuk a standardok által adott jel nagyságát a 0.001-100 ng/mL koncentrációtartományban. Mivel az immunizáláshoz a hordozó fehérje glicinjének nitrogénatomjához kötöttük a hatóanyagot, a kapott *glyphosate*-specifikus antitestek nagy affinitást mutattak az *glyphosate* N-módoított származékával szemben, ezért a vizsgálatokhoz derivatizált *glyphosate* standardokat használtunk. Direkt mérési módszer esetén túl kicsi válaszjeleket kaptunk, a szenzor felülete hamar telítődött, a módszer érzékenysége elmaradt a kívánalmaktól. Kompetitív mérési módszer esetén *glyphosate*-HSA-konjugátum került rögzítésre. A derivatizált standardot és a specifikus antitestet 1:1 arányban összekeverve injektáltuk a felszínre, és vizsgáltuk a válaszjel nagyságát. Meghatároztuk a rögzített konjugátum és az alkalmazott antitest optimális mennyiségét, és az így kialakított szenzorral kalibrációs görbét vettünk fel. A szenzor dinamikus méréstartománya 0.001–100 ng/mL, míg a kimutatási határ 0.0001 ng/mL volt. Eredményeinket referencia ELISA mérési módszerrel hasonlítottuk össze, és megállapítottuk, hogy az ELISA módszerhez képest (EC<sub>50</sub>=10.7 ng/mL) az OWLS technika érzékenysége (EC<sub>50</sub>=0.6044 ng/mL) bő egy nagyságrenddel jobb volt.

A kutatást a NVKP\_16-1-2016-0049 (AquaFluoSense), valamint a 2020-1.1.2-PIACI-KFI-2021-00300 projekt keretében végeztük.

## MÁRTÁSSAL KIALAKÍTOTT KITOZÁNBEVONATOK N-ACETILEZÉSE METANOLOS KÖZEGBEN: ÁTERESZTŐKÉPESSÉGI VIZSGÁLATOK

Márton Péter<sup>a</sup>, Nagy Örs Tamás<sup>b</sup>, Kovács Dorina<sup>a</sup>, Szolnoki Beáta<sup>a</sup>, Nagy Norbert<sup>c</sup>,  
Szabó Gabriella Stefánia<sup>b</sup>, Hórvölgyi Zoltán<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 1-3., Magyarország

<sup>b</sup> Babes-Bolyai Tudományegyetem, Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet  
400028, Kolozsvár (Cluj-Napoca), Arany János út 11, Románia

<sup>c</sup> Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet, Energiatudományi Kutatóközpont  
1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33., Magyarország  
marton.peter@vbk.bme.hu

A kitozán egy kitinből előállított biopolimer, melynek alkalmazása biokompatibilis és biodegradábilis tulajdonsága miatt számos iparágban elterjedt. A kutatómunka során néhány száz nanométer vastag kitozánbevonatokat állítottunk elő üveg- szilícium- és cinkhordozókon mártásos, illetve forgótárcsás technikával. A bevonatokat ecetsavanhidriddel kémiaiilag módosítottuk, hogy növeljük azok N-acetilezettségi fokát (körülbelül 30%-ról 100%-ra). Az acetilezettségi fokban és ezzel együtt a vékonyréteg szerkezetében bekövetkező változásokat infravörös- és UV-látható spektroszkópiai módszerekkel tanulmányoztuk. Vizsgálataink kimutatták, hogy a kitozánbevonatok permeabilitása (színezékáteresztése) és az anyag N-acetilezettségi foka<sup>1</sup>, illetve az impregnáló közeg pH-ja közt szoros kapcsolat van. Ezt a kapcsolatot a bevonatok felületi és tömbi tulajdonságainak acetilezés hatására bekövetkező megváltozásával értelmeztük. A felületi tulajdonságokat nedvesedési vizsgálatokkal (peremszögméréssel) és atomi erő mikroszkópiás mérésekkel jellemeztük. A tömbi tulajdonságok változását elektrokémiai módszerekkel (polarizációs tesztek és impedancia-spektroszkópia) és duzzadási vizsgálatokkal jellemeztük (*in situ* pásztázó szögű reflektometriával egy erre a célra készített folyadékkamrában). Az eredmények a későbbiekben kitozánalapú membránok és szabályozott hatóanyag-leadó rendszerek fejlesztése során lesznek hasznosíthatók.

1. P. Márton, Ö. T. Nagy, D. Kovács, B. Szolnoki, J. Madarász, N. Nagy, G. S. Szabó, Z. Hórvölgyi: Barrier behaviour of partially N-acetylated chitosan layers in aqueous media, *International Journal of Biological Macromolecules* **2023**, 232, 123336

A kutatáshoz hozzájárult a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-128266 számú (OTKA) pályázata. A TKP2021-NVA-02 és TKP2021-EGA-02 számú projektek a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a TKP2021-NVA és TKP2021-EGA pályázati programok finanszírozásában valósultak meg. A kutatómunkát az Új Nemzeti Kiválóság program ÚNKP22-3-I-BME-156 számú pályázata támogatta.

## ALUMÍNIUM-KOMPLEX KENŐZSÍROK ALKALMAZÁSTECHNIKAI JELLEMZŐINEK JAVÍTÁSA

**Nagy Gábor Zoltán<sup>a,b</sup>, Pölczmann György<sup>a</sup>, Nemesnyik Ákos<sup>a</sup>, Nagy Roland<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> MOL-LUB Kft., Kenőanyag Termékfejlesztés, 2931 Almásfüzitő, Fő út 21.

<sup>b</sup> Pannon Egyetem, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék,  
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.  
gznagy@mol.hu

Egyre nagyobb a kereslet az alumínium-komplex típusú (AIX) kenőzsírok iránt, amelyek különféle iparágakban alkalmazhatók. Ezekben az alkalmazásokban nagyon jó mechanikai stabilitásra, továbbá magas cseppenéspontra, nagy vízállóságra, széles alkalmazási hőmérséklet-tartományra van szükség. Emellett a tribológiai tulajdonságok optimalizálása is alapvető követelmény lett. Az alumínium-komplex kenőzsírgyártók folyamatosan vizsgálják a kenőzsírok és kenőzsír sűrítő készítmények speciális igényekre és alkalmazásokra vonatkozó továbbfejlesztési lehetőségeit.

A poliizobutenil-borostyánkősav-anhidrid (PIBSA) típusú vegyületeket elsősorban a poliizobutenil-szukcinimid típusú diszpergens adalékok előállításánál alkalmazzák. Ezek a kémiai vegyületek azonban javíthatják az alumínium-komplex típusú kenőzsírok mechanikai stabilitását is. A kísérletek eredményei összefüggést mutatnak a vizsgált alumínium-komplex kenőzsírok törés utáni penetrációja és az alkalmazott PIBSA koncentrációja között. Az új eredmények azt mutatják, hogy a PIBSA szerkezetmódosítót is tartalmazó AIX kenőzsírok tribológiai tulajdonságai tovább javíthatók kénezett növényolaj alapú kopásgátló és Extreme Pressure adalék beépítésével. Vizsgálataink során azt tapasztaltuk, hogy a poliizobutenil-borostyánkősav-anhidrid típusú vegyületek alkalmazása kedvezően hat a AIX kenőzsírok szélesebb körű felhasználhatóságára, akár nagy terhelésű alkalmazási helyeken is.

**Kulcsszavak:** kenőzsír, alumínium-komplex, AIX, PIBSA, mechanikai stabilitás, kénezett növényolaj alapú adalék

## A RÓZSAMETÉNG LED FÉNNYEL TÖRTÉNŐ KEZELÉSÉNEK HATÁSA A VINCA ALKALOID BIOSZINTÉZISÚTRA: METABOLOMIKAI MEGKÖZELÍTÉS

**Nagy Katalin<sup>a,b</sup>, Darkó Éva<sup>a</sup>, Janda Tibor<sup>a</sup>, Mohamed Ramadan Rady<sup>c</sup>,  
Dernovics Mihály<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> ELKH Agrártudományi Kutatóközpont, Mezőgazdasági Intézet,  
2462 Martonvásár, Brunszvik u. 2.

<sup>b</sup> Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet,  
1118 Budapest, Villányi út 29-43.

<sup>c</sup> Department of Plant Biotechnology, National Research Centre,  
33 El Behouth st., Dokki, Giza, P.O. 12622, Egyiptom  
nagy.katalin@atk.hu

Az *Apocynaceae* családba tartozó *Catharanthus roseus* (L.; G. Don) jól ismert dísz- és gyógynövény. Számos bioaktív szekunder metabolitja közül kiemelkedő a vinblasztin és vinkrisztin, amelyeket a gyógyászatban elsősorban a rákterápiában használnak<sup>1</sup>. Ezen vinca alkaloidok előállítása részben még mindig növényi alapanyagot igényel, piaci árak pedig meglehetősen magas (vinblasztin: 2 millió \$/kg, vinkrisztin: 15 millió \$/kg)<sup>2</sup>.

A mezőgazdasági és kertészeti gyakorlatban elterjedőben lévő módszer a növények bioszintézis útvonalainak LED fénnel történő befolyásolása<sup>3</sup>. A növények kontrollált körülmények közt történő termesztése vertikális farmokon immár ipari méretekben is megvalósítható, és a megfelelő LED-es kezelés beépítése a természetstechnológiába elősegítheti a szükséges gyógyszeralapanyagok gazdaságosabb előállítását.

Kísérleteink során *C. roseus* növényeket vetettünk alá különböző LED-es kezeléseknél, majd a begyűjtött levélmintákon UPLC-ESI-QTOF-MS készülékkel végeztünk metabolomikai vizsgálatot. Részben célzott („semi-untargeted”) multikomponenses módszer segítségével az indolalkaloid bioszintézisút 14 tagját azonosítottuk analitikai standardokkal ill. a nagyfelbontású tömegspektrometriai eszköztárral (pontos tömeg, izotopológ mintázat, MS<sup>E</sup> és MS/MS fragmentáció). Többváltozós statisztikai elemzéssel vizsgáltuk, hogy a LED-es kezelések milyen hatással voltak az indolalkaloid bioszintézisút elemeire, valamint megállapítottuk, hogy mely LED-es kezelés kedvezett leginkább a vinblasztin és vinkrisztin termelésnek.

A szerzők köszönetet mondanak az MTA NKM 2021-6 bilaterális pályázatának és a MATE Élelmiszertudományi Doktori Iskolájának a projekt támogatásáért.

1. Vici P, Colucci G, Gebbia V, et al. First-line treatment with epirubicin and vinorelbine in metastatic breast cancer. *J Clin Oncol.* 2002; 20(11):2689-2694. doi:10.1200/JCO.2002.06.039
2. Kumar S, Singh B, Singh R. *Catharanthus roseus* (L.) G. Don: A review of its ethnobotany, phytochemistry, ethnopharmacology and toxicities. *J Ethnopharmacol.* 2022; 284:114647. doi:10.1016/j.jep.2021.114647
3. Darkó É, Hamow KA, Marček T, Dernovics M, Ahres M, Galiba G. Modulated Light Dependence of Growth, Flowering, and the Accumulation of Secondary Metabolites in Chilli. *Front. Plant Sci.* 2022; 13:801656. doi: 10.3389/fpls.2022.801656

## ALTERNATÍV MINTAELŐKÉSZÍTÉSI ELJÁRÁS VANÍLIA (*VANILLA PLANIFOLIA*) AFLATOXIN SZENNYEZETTSÉGÉNEK MEGHATÁROZÁSÁRA UPLC-MS/MS MÓDSZERREL

**Nagy Katalin<sup>a,b</sup>, Balázs Viktória Bernadett<sup>b</sup>, Varga Emese<sup>b</sup>, Üveges Márta<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> ELKH Agrártudományi Kutatóközpont, Mezőgazdasági Intézet,  
2462 Martonvásár, Brunszvik u. 2.

<sup>b</sup> Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet,  
1118 Budapest, Villányi út 29-43.  
nagy.katalin@atk.hu

A mikotoxinokkal szennyezett fűszerek komoly élelmiszerbiztonsági kockázatot jelentenek a fogyasztók számára. A szárított fűszerek kis vízakivételük ellenére többféle módon szennyeződhetnek mikotoxinokkal. Számos fűszer trópusi területről származik, ahol hagyományos természetstechnológiát (pl. földön történő szárítást) alkalmaznak, ami a szántóföldi penészekkel való fertőzés veszélyét növeli. A szállítás és raktározás során pedig raktári penészekkel történő fertőzés kockázata áll fenn.

Az elsősorban *Aspergillus* nemzetségbe tartozó penészgombák által termelt aflatoxinok már igen kis mennyiségben karcinogén, mutagén és teratogén hatásúak, élelmiszereinkben való jelenlétük nemkívánatos<sup>1</sup>.

A RASFF jelentések nagy hányada, takarmányok esetén szinte 100%-a aflatoxin szennyezettségről szól<sup>2</sup>. A minták heterogenitása, a mátrix összetettsége és a jogszabályi előírásban rögzített kis mérendő koncentrációk még kapcsolt analitikai technikák alkalmazásával is kihívást jelentenek aflatoxinok meghatározása esetén<sup>3,4</sup>.

Munkánk során vanília (*Vanilla planifolia*) örlemény aflatoxin-tartalmának meghatározásához alkalmaztunk MycoSpin<sup>TM</sup> mintatisztítási technikát egy korábban kidolgozott UPLC-MS/MS módszert<sup>5</sup> megelőzően. Működési elvét tekintve a MycoSpin a szilárd fázisú extrakciós technikák családjába sorolható. A mintatisztítás hatékonyságáról a QuEChERS<sup>6</sup> módszerrel való összevetéssel győződöttünk meg.

Az eredetileg gabonamátrixra kifejlesztett MycoSpin megfelelő hatékonysággal alkalmazható vanília örlemény esetén, idő- és energiahatékony alternatívája lehet a toxinanalitikában hagyományosnak mondható QuEChERS mintaelőkészítési eljárásnak.

Köszönet a MATE Élelmiszertudományi Doktori Iskolájának.

1. Sarma UP, Bhetaria PJ, Devi P, Varma A. Aflatoxins: Implications on Health. *Indian J Clin Biochem.* 2017; 32(2):124–133. doi: 10.1007/s12291-017-0649-2.
2. Alshannaq A, Yu JH. Analysis of E.U. Rapid Alert System (RASFF) Notifications for Aflatoxins in Exported U.S. Food and Feed Products for 2010-2019. *Toxins (Basel).* 2021; 13(2):90. doi: 10.3390/toxins13020090.
3. 401/2006/EK rendelet
4. 2002/657/EK határozat
5. Andrásó D. Zs. UHPLC-MS/MS módszer optimalizálása és mintaelőkészítési technikák összehasonlítása mikotoxinok meghatározására vanília mintából. 2021
6. MSZ EN 15662:2018 Növényi eredetű élelmiszerek. Peszticid szermaradékok meghatározásának multimódszere acetonnitriles extrakciót/szétválasztást és diszperziós SPE-tisztítást követő GC- és LC-alapú vizsgálattal

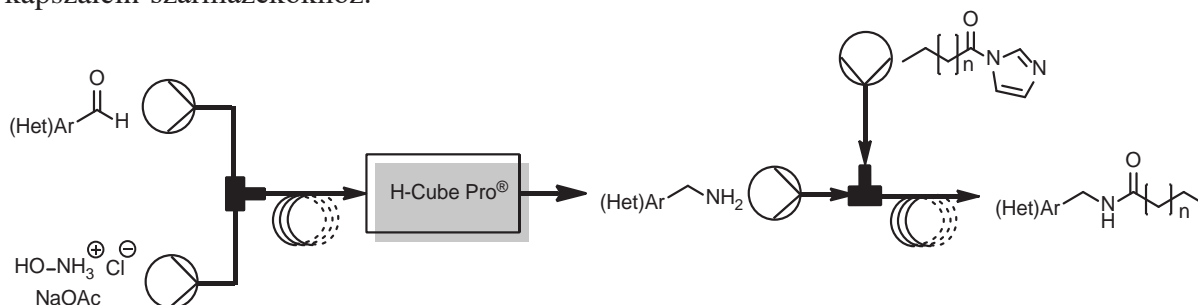
## KAPSAICINOIDOK ÉS HETEROCIKLUSOS ANALÓGJAIK SZINTÉZISE ÁRAMLÁSOS KÉMIAI RENDSZEREKBEN

**Orosz János Máté, Gyöngyössy Ádám, Rávai Bettina, Mátravölgyi Béla, Bálint Erika**

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,  
1111 Budapest, Budafoki út 8.  
orosz.janosmate@edu.bme.hu

A kapszaicint, mint a csípős paprika fő hatóanyagát széles körben alkalmazzák a gyógyszer- és az élelmiszeriparban egyaránt. Kutatómunkánk során célul tűztük ki kapszaicin-származékok és heteroaromás analógjaik előállítását áramlásos kémiai rendszerekben. Az áramlásos kémiai szintézis fejlesztésénél a hagyományos szintézisekhez képest egy gyorsabb és nagyobb hozamú technológia megvalósítására törekedtünk. Célunk volt továbbá a kapszaicinoidok gombaölő és antibakteriális hatásának vizsgálata is.

A kapszaicinoidok és analógjaik háromlépéses szintézisét egy félfolyamatos, áramlásos kémiai rendszerben terveztük megvalósítani. Ehhez első lépésben célunk volt különböző benzaldehidekből kiindulva aldoximok képzése, melyeket folyamatos hidrogénező reaktoron (H-Cube Pro<sup>®</sup>) átvezetve, a megfelelő primer aminokká kívántunk alakítani. Az aminokat aktivált, hosszú szénláncú karbonsavakkal Asia<sup>®</sup> rendszerben acilezve jutottunk a kívánt kapszaicin-származékokhoz.



Az egyes lépések optimalizálását modellreakciókon keresztül végeztük, melyek során több paraméter (áramlási sebesség, hőmérséklet, nyomás) hatását vizsgáltuk. A reakciókat kromatográfiás (GC, HPLC) és tömegspektrometriás (GC-MS, LC-MS) módszerekkel követtük. Az előállított vegyületek szerkezetét <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C NMR és nagyfelbontású tömegspektrometriás (HRMS) vizsgálatokkal igazoltuk.

A kapszaicinoidok *Fusarium graminearum* gombafajra, valamint *Bacillus subtilis* baktériumfajra gyakorolt hatását együttműködés keretében teszteltük. A nagyobb vízoldhatóság és biocid hatás növelése érdekében, elvégeztük a kapszaicinoidok komplexképzését is hidoxipropil-β-ciklodextrinnel.

Köszönetnyilvánítás:

A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal Piaci KFI pályázat 2020-1.1.2-PIACI-KFI-2021-00234 támogatásával készült.

## MIT AD A KÖTŐANYAGOK MEGISMERÉSÉHEZ A FOLYÉKONY FÁZISÚ NMR?

**Papp Vanda<sup>a,b,c</sup>, Kertész Tamás Péter<sup>a</sup>, Nyul Dávid<sup>a,b</sup>, Janovics Róbert<sup>c</sup>,  
Bányai István<sup>a</sup>, Kéri Mónika<sup>a</sup>**

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

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Kémia Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>c</sup> Isotoptech Zrt., 4026. Debrecen, Bem tér 18.

papp.vanda@science.unideb.hu

A radioaktív hulladék kondicionáláshoz tervezett kötőanyagok esetén a szilárd mátrixnak számos kritériumnak (pl.: nyomószilárdság, kioldhatóság, porozitás, vízzárósági teszt) meg kell felelnie, melyek közül az egyik legfontosabb a porózus szerkezet száraz és vizes közegű ismerete. Ennek vizsgálatára alkalmasak a folyékony fázisú mágneses magrezonanciás módszerek (NMR), melyek esetén a porózus szerkezetet kitöltő folyadék fizikai tulajdonságainak megváltozásából nyerhetünk információt a szilárd anyag szerkezetéről és a folyadék rendszeren belüli dinamikus viselkedéséről. Pórusos anyagok karakterizálására csoportunk már évek óta alkalmazza ezeket a nem szokványos NMR technikákat (relaxometria, krioporozimetria, diffúziometria és NMR MoUSE).

Az NMR relaxometriás mérések során a  $T_2$  relaxációs időállandók alapján elkülöníthetők a mintában található eltérő mobilitású víztípusok, és a felületi relaxivitás ismeretében a pórusméret is számítható nm-es mérettartományban.<sup>1,2</sup> A  $T_2$  relaxációs idők változásának követése, különböző paraméterek (pl. víztartalom, idő) függvényében lehetőséget ad a porózus rendszer hidratációjának, degradációjának, kialakulásának követésére vagy akár a kötőanyag kötött víztartalmának meghatározására.<sup>2,3</sup> A különböző mobilitású folyadékok közötti átjárhatóságról, kapcsolatról pedig a  $T_1$ - $T_2$  korrelációs vizsgálatok szolgáltatnak információt.

Az NMR krioporozimetriával a nanométeres pórusok méretét és alakját tudjuk meghatározni, míg az NMR diffúziometria segítségével meghatározható a víz saját diffúziós (Brown - mozgás) együtthatója, melynek értéke jelentősen függ a rendszer permeabilitásától. Ez utóbbi a hagyományos módon nehezen vizsgálható mágneses inhomogenitásokat tartalmazó minták esetén (pl. cementek), melyre egy speciális  $H_2O$ -  $D_2O$  csere diffúziós technika nyújt megoldást.<sup>4</sup> Mindezek mellett egy kisméretű, egyoldalú mágnes, az NMR MoUSE segítségével lehetőségünk nyílik nagyobb minták aprításmentes vizsgálatára is.

Ezen technikák kombinációjával átfogó képet kaphatunk egy porózus kötőanyag folyékony közegben való viselkedéséről, kötési folyamatáról, egyes hozzáadott adalékok vagy az alkalmazási körülmények szerkezetre való hatásáról és akár kioldhatósági tulajdonságairól is.

1. S.G. Allen, P.C.L. Stephenson, J.H. Strange, *J. Chem. Phys.* **1997**, 106(18), 7802-7809.

2. M. Kéri, D. Nyul, K. László, L. Novák, I. Bányai, *Carbon*, **2022**, 189, 57-70.

3. Rusu, M.M.; Faux, D.; Ardelean, I., *Molecules*, **2023**, 28, 476.

4. M. Fleury, G. Berthe, T. Chevalier, *Magnetic Resonance Imaging*, **2019**, 56, 32–36.

A RH/322-2/2022 számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a KDP-2021 pályázati program finanszírozásában valósult meg. A kutatást az NKFI Hivatal (PD 135169, K 131989) támogatta. A kutatás az RHK szerződésének keretében valósult meg.

## KOVALENS STRATÉGIA ALKALMAZÁSA RENDEZETLEN FEHÉRJÉK, MINT GYÓGYSZERKÉMIAI CÉLPONTOK ESETÉBEN: TAU AGGREGÁCIÓ GÁTLÓK FEJLESZTÉSE

**Petri László<sup>a</sup>, Ábrányi-Balogh Péter<sup>a</sup>, Vagrýs Darius<sup>b</sup>, Imre Tímea<sup>c</sup>, Varró Nikolett<sup>d</sup>, Mándity István<sup>d</sup>, Bajusz-Rácz Anita<sup>e</sup>, Wittner Lucia<sup>f</sup>, Tóth Kinga<sup>f</sup>, Tóth Estilla Zsófia<sup>f</sup>, Juhász Tünde<sup>g</sup>, Davis Ben<sup>b</sup>, Keserű György Miklós<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt 2.

<sup>b</sup> Vernalis Research Ltd., Granta Park, Cambridge CB21 6GB, UK

<sup>c</sup> TTK MS Metabolomika Kutatólaboratórium, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt 2.

<sup>d</sup> TTK Mesterséges Transzporterek Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt 2.

<sup>e</sup> TTK Plazmakémiai Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt 2.

<sup>f</sup> TTK Integratív Idegtudományi Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt 2.

<sup>g</sup> TTK Biomolekuláris Önrendeződés Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok krt 2.

petri.laszlo@ttk.hu

A rendezetlen szerkezetű fehérjék (angolul: intrinsically disordered proteins, röviden IDP-k) számos patobiokémiai folyamat során játszanak fontos szerepet;<sup>1</sup> azonban a jól definiálható 3D struktúrák hiányában a hagyományos gyógyszertervezési stratégiák általában nem hatékonyak ezekkel a célpontokkal szemben. Kismolekulás hatóanyagokkal nehezen modulálható IDP-k esetében korábban már sikerült ígéretes eredményeket elérnünk célzott kovalens inhibitorok (TCI-k) alkalmazásával,<sup>2</sup> ezért kidogoztunk egy, az IDP-ket célzó kovalens hatóanyag-fejlesztési stratégiát.<sup>3</sup> Modellrendszernek a taut választottuk, a központi idegrendszer endogén IDP-jét, amelynek túlzott aggregációja súlyos neurodegeneratív betegségek kórképében játszik szerepet (pl. Alzheimer-kór).<sup>4</sup> Először feltérképeztük a tau fehérje szerkezetében elérhető ciszteinek reaktivitását, majd kovalens fragmentek segítségével azonosítottuk a legjobban alkalmazható kovalens kötőelemeket. Ezután az így kiválasztott vinilszulfon elektrofil szerkezeti egységet beépítettük a lehetséges tau aggregációt gátló hatóanyagok nem-kovalens alapszerkezetébe. A tervezett vegyületeket előállítottuk és fehérje aggregációs modellben teszteltük, amely során megállapítottuk, hogy az általunk előállított kovalens gátlószerkek sikeresen csökkentik a tau fehérje aggregációjának mértékét. Eredményeink alátámasztják a kovalens hatóanyag-tervezési stratégia hasznosságát terápiásan releváns IDP célpontokkal szemben, ugyanakkor ígéretes jelölteket szolgáltattak a tauopátiák kezelésére.

1. Babu, M.M.; van der Lee, R.; de Groot, N.S.; Gsponer, J. *Curr. Opin. Struct. Biol.* **2011**, *21*, 432.

2. Nguyen, H.H.; Ábrányi-Balogh, P.; Petri, L.; Mészáros, A.; Pauwels, K.; Vandenbussche, G.; Keserű, G.M.; Tompa, P. *Methods Mol. Biol.* **2020**, *2141*, 835.

3. Petri, L.; Ábrányi-Balogh, P.; Vagrýs, D.; Imre, T.; Varró, N.; Mándity, I.; Rácz, A.; Wittner, L.; Tóth, K.; Tóth, E.Z.; Juhász, T.; Davis, B.; Keserű G.M. *Eur. J. Med. Chem.* **2022**, *231*, 114163.

4. Arendt, T.; Stieler, J.T.; Holzer, M. *Brain Res. Bull.* **2016**, *126*, 238.

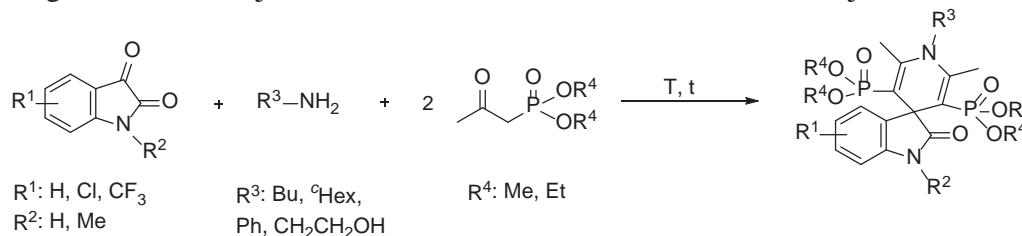
## IZATINALAPÚ SPIROOXINDOL-DIHIDROPIRIDINEK ÉS SPIROXANTÉNEK ELŐÁLLÍTÁSA

**Rávai Bettina, Németh Áron Soma, Steinsits Dániel, Bálint Erika**

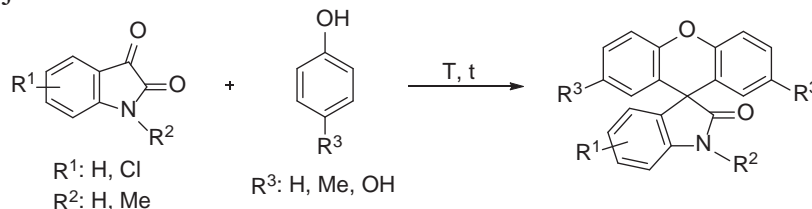
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.  
ravai.bettina@edu.bme.hu

A nitrogén tartalmú heterociklusok fontos képviselője az izatin, mely számos természetes és szintetikus molekula (pl. daganat-, tuberkulózis- és maláriaellenes hatóanyagok) építőköve<sup>1</sup>. Speciális reakcióképességét a rendkívül reaktív C-3 karbonil csoport jelenti, mely spirogyűrűzárásokon és nukleofil addíciókon keresztül spirooxindol-származékok és egyéb kiterjedt heterociklusok előállítását teszi lehetővé. A xantének erősen kromofór és fluoreszcens tulajdonságú vegyületek, legelterjedtebb képviselőik a xanténfestékek (pl. Pironin, Fluorscein, Rodamin)<sup>2</sup>. Előnyös fotokémiai tulajdonságaik mellett, jó vízdékonyságuk és könnyű szerkezeti módosíthatóságuk miatt napjainkban a szerves kémia egyik igen népszerű tudományterülete<sup>3</sup>.

Kutatómunkám során egyrészt célul tűztük ki különböző, az irodalomban eddig nem ismert spirooxindol-dihidropiridinek előállítását változatos izatinok,  $\beta$ -ketofoszfónátok és primer aminok Hantzsch-típusú reakcióján keresztül. Első lépésben egy modellreakció körülményeit (hőközlés, hőmérséklet, reakcióidő, molarányok, katalizátorok) változtatva optimalizálást végeztünk, majd a reakciót további vegyületekre is kiterjesztettük. Emellett vizsgálni kívántuk izatinok és különböző aktív metilén csoportot tartalmazó vegyületek (pl.: acetecetészter) Knoevenagel-kondenzációját is különböző szerves és szervetlen bázisok jelenlétében.



A kutatómunka további részében spiroxantének előállítását tanulmányoztuk izatinok és fenol-származékok reakciójában, melyben a gyűrűzárás lehetőségét különböző katalizátorok és oldószerek jelenlétében vizsgáltuk. Célunk volt továbbá xantén-ciklodextrin konjugátumok előállítása alkin- vagy azid-módosított xantének és azid- vagy alkin-szubsztituált ciklodextrinek „klikk”-reakciójával.



1. J. F. M. da Silva; S. J. Garden; A. C. Pinto, J. Braz., *Chem. Soc.*, **2001**, *12*, 273.
2. D. C. Neckers, O. M. Valdes-Aguilera, *Advances in Photochemistry*, **1993**, *18*, 315.
3. S. G. Keller, M. Kamiya, Y. Urano, *Molecules*, **2020**, *25*, 5964.

A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal FK142712 pályázat részfinanszírozásával készült.

## ELTÉRŐ LAKTÁCIÓS IDŐSZAKBÓL SZÁRMAZÓ ANYATEJ MINTÁK ZSÍRSAV-PROFIL VIZSGÁLATA

Üveges Márta<sup>a</sup>, Zhang Miaomiao<sup>a,b</sup>, Simonné Sarkadi Livia<sup>b</sup>, Tormási Judit<sup>a</sup>,  
Benes Eszter<sup>a</sup>, Vass Réka Anna<sup>c</sup>, Vari G. Sándor<sup>d</sup>

<sup>a</sup> MATE, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet Élelmiszerkémia és -Analitika Tanszék,  
1118 Budapest Villányi út 29-43.

<sup>b</sup> MATE, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet, Táplálkozástudományi Tanszék,  
1118 Budapest Ménesi út 45.

<sup>c</sup> Pécsi Tudományegyetem, Szülészeti és Nőgyógyászati Klinika, Orvostudományi Kar,  
Országos Humán Reprodukciós Laboratórium 7624 Pécs, Édesanyák útja 17.

<sup>d</sup> International Research and Innovation in Medicine Program, Cedars-Sinai Medical Center,  
8700 Beverly Blvd, Los Angeles, CA 90048 USA  
[simonne.sarkadi.livia@uni-mate.hu](mailto:simonne.sarkadi.livia@uni-mate.hu)

Az Egészségügyi Világszervezet (WHO) a szülés utáni első hat hónapban a csecsemő táplálására kizárólag az anyatejes (HM) táplálást, szoptatást javasolja<sup>1</sup>. A szoptatás mind a csecsemő, mind az anya számára előnyös. Az anyatej összetétele a csecsemő igényeihez igazodik, elősegítve az egészséges növekedést és fejlődést. Alkotói között számos tápanyag, növekedési faktor, immunrendszeri összetevő és energiát biztosító vegyület is megtalálható. Az anyatej összetételét folyamatosan vizsgálják. Zsírtartalma 4% körüli, a benne megtalálható lipidek 98%-a triglicerid formában van jelen, és tulajdonságait nagymértékben befolyásolja a zsírsavösszetétel<sup>2</sup>. Az anyatejben található zsírsavak (fatty acid, FA) többsége telített zsírsav (SFA: kb. 48%) vagy egyszerűen telítetlen (MUFA: 40%), amelyet a többszörösen telítetlen FA-k (PUFA: 11,8%) követnek a sorban. A HM FA-összetétele számos tényezőtől függően változhat, többek között (i) attól, hogy a csecsemő időre született vagy koraszülött volt, (ii) az anya egészségi állapotától (pl. normál testsúlyú, túlsúlyos vagy elhízott, esetleg cukorbeteg), (iii) az anya étrendjétől, (iv) és nem utolsósorban a szoptatási időszaktól.

Célunk az volt, hogy meghatározzuk az egészséges anyáktól származó anyatej minták zsírsavösszetételét, ez alapján megfigyeljük hogyan változik az anyatej zsírsavösszetétele a szoptatási időszak alatt.

A szoptatási időszak (1-10 hónap) alatt összesen 60 anyatej mintát gyűjtöttek egészséges és normál testsúlyú anyáktól. Az újszülöttek időben születtek és egészségesek voltak. A minták zsírsav-profil vizsgálatát módosított MSZ ISO 16958:2018 referenciamódszer alapján GC-FID méréstechnikával végeztük. A zsírsavakat kémiai tulajdonságaik szerint csoportosítottuk. Az adatokat Kruskal-Wallis teszttel és PCA módszerrel értékeltük. Azt tapasztaltuk, hogy a fő zsírsavcsoportokba sorolt komponensek relatív mennyisége eltérő tendencia szerint változott és egyes zsírsavak változása szignifikáns különbségeket mutatott a laktációs időszak függvényében.

1. WHO/UNICEF Global strategy for infant and young child feeding, Genova, 2003.

2. Bobinski, R. and Bobinska, J. Fatty acids of human milk – a review. *Int. J. Vit. and Nutr. Research*, 2020, 21, 1–12.

## 2-ALKINILBENZALDEHIDEK, AMINOK ÉS SZEKUNDER FOSZFIN-OXIDOK HÁROMKOMPONENSŰ REAKCIÓINAK VIZSGÁLATA

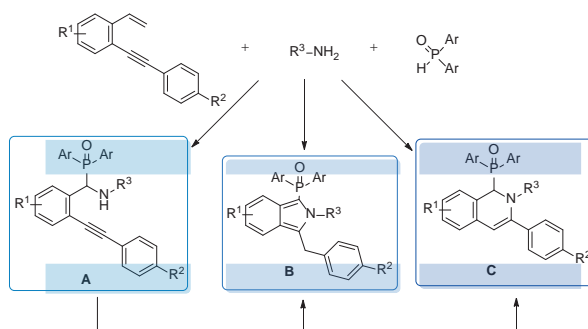
**Szabó Kármén, Popovics-Tóth Nóra, Bálint Erika**

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,  
1111 Budapest, Budafoki út 8.  
szabo\_karmen@edu.bme.hu

A szerves vegyületek legnagyobb csoportját a heterociklusok alkotják, melyek fontos szerepet töltenek be a gyógyszeriparban, a mezőgazdaságban és a műanyagiparban egyaránt<sup>1</sup>. Egyik fontos képviselőik közé tartoznak az *N*-heterociklusok, mint például a piridin, a pirimidin, vagy az imidazol, melyek származékai különféle biológiai aktivitással rendelkeznek.

A szerves kémiai szintézisek során egyre inkább előtérbe kerülnek az atomhatékony, gyors és egyszerű eljárások<sup>2</sup>. Munkánk során célul tűztük ki 2-alkinilbenzaldehidek, primer aminok és szekunder foszfin-oxidok háromkomponensű reakcióinak tanulmányozását. Először egy választott modellreakción, a 2-(fenetenil)benzaldehyd, butilamin vagy anilin és difenilfoszfin-oxid reakcióján keresztül vizsgáltuk az  $\alpha$ -amino-(2-alkinilfenil)-metil-foszfin-oxidok (**A**) előállítását az oldószer és reakció idő tekintetében, majd az optimális körülmények felhasználásával további származékok előállítását valósítottuk meg.

Ezt követően a három komponens gyűrűzárási reakcióját tanulmányoztuk, melyet egy átfogó katalizátorvizsgálattal kezdtünk, majd a leghatékonyabb katalizátorok kiválasztását követően a reakciót tovább optimalizáltuk az 1,2-dihidroizokinolin-foszfin-oxidok (**B**) és az 1,2-dihidroizokinolin-foszfin-oxidok (**C**) előállítására. A reakciók kiterjesztése után a modellreakció mechanizmusvizsgálatát végeztünk el, illetve tanulmányoztuk az  $\alpha$ -amino-(2-alkinilfenil)-metil-foszfin-oxid (**A**) gyűrűzárását is.



A reakciókat folyadékkromatográfias (HPLC), illetve <sup>31</sup>P NMR spektroszkópiás mérésekkel követtük. A termékek szerkezetét tisztítás után <sup>31</sup>P, <sup>1</sup>H és <sup>13</sup>C NMR spektroszkópiával, valamint nagyfelbontású tömegspektroszkópiás (HRMS) vizsgálatokkal határoztuk meg. A termékek rákellenes és antibakteriális hatását a szegedi Anthelos Kft-vel együttműködésben vizsgáltuk.

A kutatás az NKFIH FK123961 pályázat finanszírozásával, a Richter Gedeon Nyrt. Talentum Alapítvány támogatásával és a szegedi Anthelos Kft-vel együttműködésben készült.

1. Pozharskii A. F.; Soldatenkov, A. T.; Katritzky A. R. (Eds.), *Heterocycles in Life and Society*, Wiley, Chichester, **2011**.

2. Cioc, R. C.; Ruijter, E.; Orru, R. V. A. *Green Chem.* **2014**, *16*, 2958.

## ANHIDRO-ALDÓZ OXIMOK ÁTALAKÍTÁSI LEHETŐSÉGEINEK VIZSGÁLATA

**Bence Szakács<sup>a</sup>, Tímea Kaszás<sup>a</sup>, Tekla Blága<sup>a</sup>, Hina Shafique<sup>a</sup>, Zoárd Ecsedi<sup>a</sup>,  
Kyle Doherty<sup>b</sup>, Éva Juhász-Tóth<sup>a</sup>, Trinidad Velasco-Torrijos<sup>b</sup>, László Somsák<sup>a</sup>,  
Marietta Tóth<sup>a</sup>**

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

<sup>b</sup> Maynooth University, Human Health Institute,  
W23 F2K8, Maynooth, Co. Kildare, Ireland  
szakacs.bence@science.unideb.hu

A *Candida albicans* egy dimorf élesztőgomba, amely kommenzális állapotban előfordulhat a nyálkahártyában és a gyomor-bél traktusban<sup>1</sup>, immunhiányos állapotokban pedig patogénné válhat, például szuperficiális és szisztémás fertőzések esetén.<sup>2</sup> A *Candida*-fajok nagy patogenitása összefügghet a gazda szervezethez történő erős adhézióval. A sejtfelszíni glikánok a *C. albicans* fontos receptorai, így lehetővé teszik az adhéziót gátló ligandumok kifejlesztését, amelyek a receptorok mimetikumaként megzavarhatják a *C. albicans* és a hámsejtek közötti kölcsönhatásokat.<sup>3</sup> A közelmúltban elvégzett divalens szénhidrátszármazékok biológiai vizsgálata alapján a triazol egységekkel egy aromás maghoz kapcsolt galaktózszármazékok bizonyultak a *C. albicans* leghatékonyabb antiadhéziós szerének.<sup>4</sup>

Kutatócsoportunkban egyszerű módszert dolgoztak ki anhidro-aldóz oximok anhidro-aldononitrilekből történő előállítására: a glikozil-cianid redukciója során képződő imin közttermék *in situ* megkötését szemikarbaziddal, majd a képződő szemikarbazon transziminálási reakcióját hidroxilamin-hidrokloriddal végezték.<sup>5</sup> Az így előállított oximokból nitril-oxid állítható elő *in situ* halogénezéssel és eliminációval, vagy hypoal történő oxidációval. A képződő nitril-oxidból C-C kettős- és hármas-, illetve C-N hármas kötésekkel heterociklusok állíthatók elő dipoláris cikloaddíciókban.

Kutatómunkánk célja az anhidro-aldóz oximokból generált nitril-oxidok átalakítási lehetőségeinek szisztematikus vizsgálata volt, amely során glikopiranozilidén-spiro- és C-glikozil-heterociklusos vegyületeket állítottunk elő, amelyek a *C. albicans* új antiadhéziós szereit lehetnek, valamint glikogén-foszforiláz és galektin gátló hatásuk is lehet.

1. Arendorf, T. M.; Walker, D. M. *Arch. Oral Biol.* **1980**, *25*, 1-10.
2. Naglik, J.; Albrecht, A.; Bader, O.; Hube, B. *Cell Microbiol.* **2004**, *6*, 915-926.
3. Albrecht, A.; Felk, A.; Pichova, I.; Naglik, J. R.; Schaller, M.; de Groot, P.; MacCallum, D.; Odds, F. C.; Schafer, W.; Klis, F.; Monod, M.; Hube, B. *J. Biol. Chem.* **2006**, *281*, 688-694.
4. Martin, H.; Mc Govern, M.; Abbey, L.; Gilroy, A.; Mullins, S.; Howell, S.; Kavanagh, K.; Velasco-Torrijos, T. *Eur. J. of Med. Chem.* **2018**, *160*, 82-93.
5. Tóth, M.; Somsák, L. *Carbohydr. Res.* **2003**, *388*, 1319-1325.

A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal PD 142641 számú pályázat támogatásával, az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-22-3-I-DE-390 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával, és a COST CA18132 számú pályázat támogatásával készült.

## HIDROXI-METILÉNBISSFOSZFONÁTOK ÉS SZÁRMAZÉKAIK SZINTÉZISE

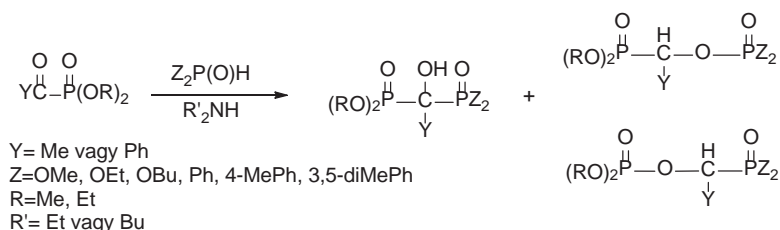
**Szalai Zsuzsanna<sup>a</sup>, Tóth Szigfrid Boldizsár<sup>a</sup>, Bősze Szilvia<sup>b</sup>, Szabó Rita<sup>b</sup>, Ábrányi-Balogh Péter<sup>c</sup> és Keglevich György<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

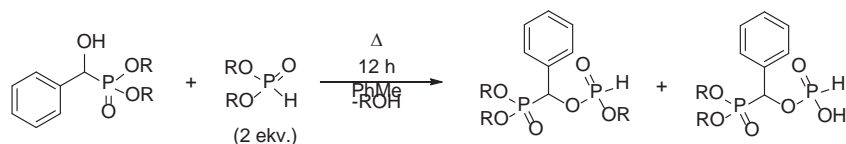
<sup>b</sup> Peptidkémiai Kutatócsoport, Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.

<sup>c</sup> Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.  
szalai.zsuzsanna@edu.bme.hu

Az  $\alpha$ -oxofoszfónátok és dialkil-foszfítok Pudovik-reakciója hidroximetilénbiszfoszfónátokat (addukt), illetve bizonyos feltételek esetén azok átrendezett származékait eredményezi.<sup>1,2</sup> Kutatómunkám során acetyl-klorid, valamint benzoyl-klorid trialkil-foszfítokkal történő Arbuzov-reakciójával  $\alpha$ -oxofoszfónátokat képeztem, majd azokat dialkil-foszfítokkal és diarilfoszfin-oxidokkal reagáltattam szekunder amin katalizátorok jelenlétében, különböző körülmények (hőmérséklet, oldószer és molarány) között, amikor adduktok és átrendeződött származékok képződtek. A kétféle (addukt és átrendeződött) termék képződésére optimalizált körülményeket a katalizátor mennyiségének és a hőmérséklet változtatásával derítettük fel.<sup>3</sup> Az előállított új vegyületeket teljeskörűen jellemeztük, valamint négy különböző sejtvonalon (humán emlő adenokarcinóma, prosztata kissejtes karcinóma, tüdő laphámsejtes karcinóma, epidermoid karcinóma sejtvonal) citotoxicitás vizsgálatoknak is alávetettük. Az eredmények néhány vegyület esetén több sejtvonalon is jelentős sejtpusztító hatást mutattak.



Egy másik módszer szerint  $\alpha$ -hidroxifoszfónátok és dialkil-foszfítok reakciójával kíséreltük meg előállítani a megfelelő biszfoszfonsav-észtereket. A reakciókban viszont meglepetésre nem a várt vegyületet, hanem annak átrendeződött és részlegesen hasadt származékát kaptuk.



1. Grün A., Molnár I. G., Bertók B., Greiner I., Keglevich Gy.; *Heteroatom Chem.*; **2009**; 20; 350.
2. Keglevich Gy., Grün A., Molnár I. G., Greiner I.; *Heteroatom Chem.*; **2011**; 5; 645.
3. Szalai Zs., Keglevich Gy.; *Molecules*; **2021**; 26; 7575.

A munka Richter Gedeon Talentum Alapítvány támogatásával, a „Richter Gedeon Kiválósági PhD Ösztöndíj” keretében készült.

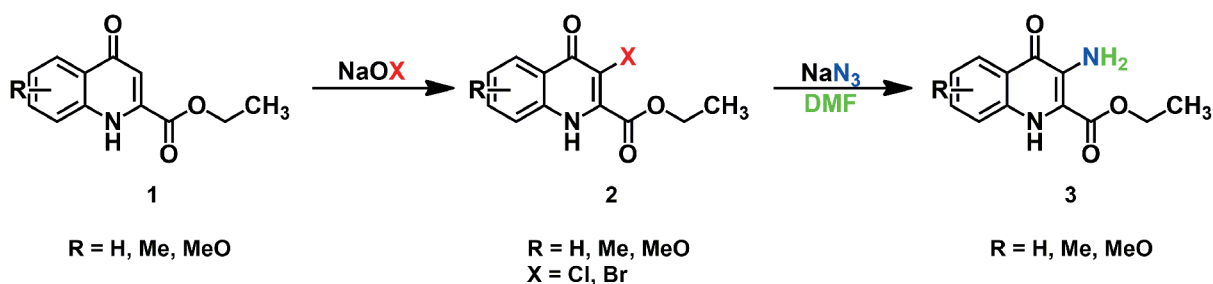
## C3-FUNKCIONALIZÁLT 4-OXO-1,4-DIHIDROKINOLIN-2-KARBONSAVAK SZINTÉZISE ÉS TOVÁBBALAKÍTÁSAI

**Törteli Levente<sup>a</sup>, Simon Péter<sup>a</sup>, Szatmári István<sup>a, b</sup>**

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

<sup>b</sup> ELKH Sztereokémiai Kutatócsoport, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.  
torteli0515@gmail.com

A kinurénsav (4-oxo-1,4-dihidrokinolin-2-karbonsav, KYNA) egy a központi idegrendszerben L-triptofánból keletkező molekula, amely több receptor endogén ligandja. Egyes kórképekben koncentrációjának változása tapasztalható, például csökkenése figyelhető meg Parkinson-kór, Huntington-kór és Alzheimer-kór esetében, míg Down-szindrómás, illetve skizofréniában szenvedő betegeknél növekedett szintjét tapasztalták. A központi idegrendszerben betöltött komplex szerepe miatt ígéretes gyógyszerterápiás célpont. Savas jellegéből adódóan azonban nem kedvező a vér-agy gáton keresztüli penetrációja.<sup>1</sup> Irodalmi adatok alapján a központi idegrendszerben gyulladáshoz vezető folyamatok során 3-klórkínurénsav, illetve 3-bromkínurénsav is keletkezhet.<sup>2</sup>



Elsődleges célunk a kinurénsav és B-gyűrűn metil- vagy metoxifunkciót tartalmazó származékainak megfelelő mennyiségű preparatív kémiai előállítás volt. További célkitűzésünk a halogénezett kinurénsav analógok további funkcionálizálása volt. A DMF közegű azidálási reakció közben egy nem várt redukció során, teljes konverzió mellett kialakult a további kémiai finomhangolásra lehetőséget adó C3-amin funkció.

1. Tóth, F.; Fülöp, F.; Szatmári, I.; Toldi, J.; Dékány, I.; Vécsei, L. *Orv. Hetil.* **2020**, *161*, 443.

2. Suzuki, T.; Morishita, H.; Fukuhara, K. *J. Clin. Biochem. Nutr.* **2021**, *68*, 215.

## BIOAKTÍV KOMPONENSEKET TARTALMAZÓ ÉLELMISZEREK HATÁSA A TRIGLICERIDEK EMÉSZTHETŐSÉGÉRE ÉS A FEHÉRJE-EMÉSZTÉSRE

**Tormási Judit, Abrankó László**

*Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet,  
Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék, 1118 Villányi út 35-43, Budapest, Magyarország  
tormasi.judit@uni-mate.hu*

A tápanyagok biológiai hozzáférhetősége több tényezőtől függ. Ennek meghatározására alkalmas egyik elfogadott módszer, a nemzetközi kooperáció eredményeként létrehozott, statikus *in vitro* Infogest emésztésszimulációs modell. Az emésztésszimulációs modellhez kapcsolható – az emésztmények és a termékek vizsgálatára egyaránt alkalmas – analitikai módszerek azonban nem egységesek és sokszor nem is kellően kidolgozottak.

A bemutatott munka célja, élelmi zsiradékok és fehérjék emészthetőségének meghatározására alkalmas emésztésszimulációs platform (emésztési modell és a kapcsolódó analitikai módszerek) összehangolása, valamint e platformnak az élelmiszeriparhoz és a táplálkozástudományhoz köthető feladatokra való alkalmasságának igazolása.

A zsír emészthetőség vizsgálatára kidolgozott GC-FID alapú módszer lényege, az Infogest emésztésszimulációs módszer eredményeként kapott, szimulált vékonybélfolyadékából történő szabad zsírsav meghatározás. A kidolgozott módszer során alkalmazott Bligh és Dyer féle extrakciós eljárás lehetővé teszi, hogy azonos extrakciós módszert, illetve azzal összehangolt származékképzési és GC-FID eljárást alkalmazzunk az emésztendő termék és abból készült emésztmény vizsgálatára. Emellett a módszer alkalmas mechanisztikus vizsgálatok (csak kiválasztott lipolitikus enzimek felhasználásával, gyomri-, és hasnyálmirigy lipáz vagy csak hasnyálmirigy lipáz) végrehajtására is. A kidolgozott eljárás lehetőséget teremt a zsíremészthetőséggel párhuzamosan, a fehérjeemészthetőség meghatározása is ugyanabból a vékonybélfolyadékából. A kidolgozott eljárásokat különböző alkalmazásokban teszteltük. Ennek során, a kiválasztott tesztélelmiszerek (tejszín, tejföl, tejfölanalóg, sültponty- és sültmarhahús ételek) zsír- és fehérjeemészthetőségének meghatározása mellett, három további lehetséges alkalmazási területen igazoltuk a platform használhatóságát, melyeket egy-egy példával is illusztrálunk: i) bioaktív komponenseket tartalmazó élelmiszerek (szőlőmagpor és fekete tea) zsíremészthetőségre (tejszín és sült marhahús) gyakorolt hatásának vizsgálata, ii) főtt tészta fehérjék jelenlétének hatása a tejföl és tejfölanalóg zsíremészthetőségére az élelmiszerek együttemésztése során, iii) különböző eredetű zsiradékok (tizenegy féle növényi olaj) jelenlétének hatása főtt tészta fehérje-emészthetőségére együttemésztés során.

Az módszerek alkalmazásának eredményeiből levonható főbb következtetések; i) a hasnyálmirigy lipáz kevésbé preferálja a rövid és közepes láncú zsírsavakat is tartalmazó triglicerideket, ami nem jellemző a gyomri lipázra; ii) a vizsgált bioaktív komponenseket tartalmazó élelmiszerek hatása nagyobb mértékben befolyásolja a hasnyálmirigy lipáz aktivitását, mely az enzim diszpreferenciája miatt a rövid és közepes szénláncú zsírsavak felszabadulását tovább csökkenti; iii) a zsír felszabadulást azonos mátrixból, a lipid szerkezet és -cseppméret, valamint fehérjék jelenléte is befolyásolja, iv) a zsiradékok jelenléte képes csökkenteni a főtt tészta fehérjék felszabadulását.

Köszönet az OTKA K135294 pályázat finanszírozásáért.

## SUBETADEX CIKLODEXTRIN PH FÜGGŐ VISELKEDÉSÉNEK VIZSGÁLATA

**Ujj Dóra Viktória<sup>a</sup>, Benkovics Gábor<sup>a</sup>, Petr Kasal<sup>b</sup>, Bálint Erika<sup>a</sup>, Mátravölgyi Béla<sup>a</sup>**

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

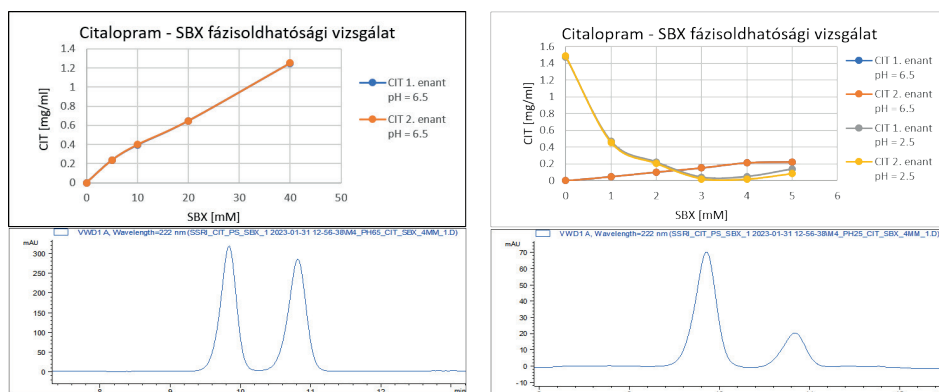
<sup>b</sup> *Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, 128 43 Prague 2, Czech Republic  
ujjd@edu.bme.hu*

A ciklodextrinek (CD-k) számos jelentős tulajdonsággal rendelkeznek, úgymint a racém vegyületek királis elválasztása vagy a vízoldékonyság fokozása. Munkánk során egy sugammadex anlog CD, a subetadex (SBX) tulajdonságait vizsgáltuk. Az SBX a primer oldalon karboxi-tioéter csoportokkal perszubsztituált, izomertiszta CD, így szerkezete és tulajdonságai könnyebben, pontosabban meghatározhatók, mint a véletlenszerűen szubsztituált CD-ké.

Eddigi kutatásaink során igazoltuk, hogy az SBX oldékonyság fokozó és enantiomerfelismerő tulajdonsága is jelentős, azonban ezek a tulajdonságok pH-függőek. Savas körülmények között a királis elválasztás, semleges körülmények között pedig a komplexképzés a domináns.<sup>1,2</sup> Alapozva a megszerzett ismeretekre ezen tulajdonságok pH-függését jelen tanulmányunkban a szelektív szerotonin visszavétel-gátló (SSRI) antidepresszáns modellvegyületeken (pl.: citalopram, fluoxetin) vizsgáljuk. Célunk, hogy meghatározzuk a körülményeket, melyek között az SBX királis felismerésre és komplexálásra a leghatékonyabban alkalmazható.

Közel semleges körülmények között a vízben oldhatatlan SSRI-k esetén jelentős oldékonyság növekedést tapasztaltunk, azonban királis elválasztás nem volt megfigyelhető. Savas körülmények között a kialakuló SSRI – SBX komplex oldhatósága jóval kisebb, mint az SSRI sóké, így jelentős oldékonyság csökkenést tapasztaltunk, viszont már 4 mM SBX jelenléte az oldatban jelentős királis felismerést eredményezett.

A leírtakat az alábbi ábra szemlélteti a citalopram - SBX példáján. Bal oldali diagram: oldékonyság növekedés, jobb oldali diagram: királis felismerés (sárga és szürke fázisoldhatósági görbe; a pH = 6,5-ön bemutatott görbék referenciaként szolgálnak). A kromatogramok mindkét esetben a 4 mM SBX-et tartalmazó racém citalopram fázisoldhatósági mintáját mutatják be.



1. Ujj, D., Kalydi, E., Malanga, M., Varga, E., Sohajda, T., Béni, S., Benkovics, G. *J. Chromatogr. A* **2022**, *1683*, 463506.

2. Kalydi, E., Malanga, M., Ujj, D., Benkovics, G., Szakács, Z., Béni, S. *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, *23*, 14448.

## CIKLOPROPANÁLÁSI REAKCIÓK VIZSGÁLATA ASZIMMETRIKUS FÁZISTRANSZFER KATALITIKUS KÖRÜLMÉNYEK KÖZÖTT

**Varga Bertalan, Orbán István, Rapi Zsolt**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,  
1111 Budapest, Budafoki út 8.  
varga.bertalan@edu.bme.hu*

A ciklopropángyűrű számos természetes vegyület és biológiailag aktív anyag építőeleme<sup>1</sup>, melyek esetenként vírus-, baktérium-, vagy tumorelles hatással rendelkezhetnek<sup>2</sup>. A ciklopropán-származékok fontos intermedierek lehetnek a preparatív kémiában is, korábban számos szintézisben sikeresen alkalmazták már őket<sup>3,4</sup>. Előállításukra egy hatékony és kíméletes módszer a Michael-iniciált gyűrűzárás (MIRC)<sup>5</sup>, melyet aszimmetrikus fázistranszfer katalitikus körülmények között végezve királis ciklopropán-termékekhez juthatunk.

Kutatócsoportunkban vizsgáltuk különböző *Michael*-akceptorok, például benzilidén-malonitril, benzilidén-indándion, cianosulfon-származékok és benzilidén-cianecetészterek szilárd-folyadék fázisú ciklopropanálását dietil-brómmalonáttal<sup>6,7,8,9</sup>. A reakciók során különböző szerkezetű monoszacharid-alapú monoaza-15-korona-5-étereket alkalmaztunk katalizátorként, melyek több esetben is nagy mértékű aszimmetrikus indukciót váltottak ki (99% ee-ig). A felhasznált szénhidrátok (pl. glükóz, galaktóz, treitol, mannitol) olcsó, természetes, nem mérgező vegyületek, a belőlük felépített koronaéterek pedig optikailag aktív, fázistranszfer katalizátorként alkalmazható makrociklusok. Különböző koronaéterek felhasználásával nyomon követtük a szerkezet változtatásának enantioszelektivitásra gyakorolt hatását, a szubsztrát és a reagens származékainak vizsgálatával pedig következtetéseket vontunk le a reakciók robusztusságával kapcsolatban. Az előállított ciklopropángyűrűt tartalmazó vegyületek a funkciós csoportjaiknak köszönhetően változatosan továbbalakíthatók, például nem természetes  $\delta$ -aminosavak szintézise válik lehetővé benzilidén-cianosulfon-származékok ciklopropanálásával.

Korábbi eredményeinket alapul véve újabb kutatásokat folytatunk más *Michael*-akceptorok (pl. azlakton-származékok) ciklopropanálására, illetve a termékek továbbalakítási lehetőségeinek vizsgálatára.

1. Faust, R. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2001**, *40*, 2251.
2. Salaün, J. *Topics in Current Chemistry*, Vol. 207, Springer-Verlag Berlin: Heidelberg, 2000; pp 2-54.
3. Nonhebel, D. C. *Chem. Soc. Rev.* **1993**, *22*, 347.
4. Goldschmidt, Z.; Crammer, B.; *Chem. Soc. Rev.* **1988**, *17*, 229.
5. Little, R. D.; Dawson, J. R. *Tetrahedron Lett.* **1980**, *21*, 2609.
6. Rapi, Zs.; Nemcsok, T.; Pálvölgyi, Á.; Keglevich, Gy.; Grün, A.; Bakó, P. *Chirality* **2017**, *29*, 257.
7. Rapi, Zs.; Nemcsok, T.; Grün, A.; Pálvölgyi, Á.; Samu, Gy.; Hessz, D.; Kubinyi, M.; Kállay, M.; Keglevich, Gy.; Bakó, P. *Tetrahedron* **2018**, *74*, 3512.
8. Nemcsok, T.; Rapi, Zs.; Bagi, P.; Guan, Y. H.; Orbán, I.; Keglevich, Gy.; Bakó, P. *Tetrahedron* **2020**, *76*, 130965.
9. Orbán, I.; Varga, B.; Bagi, P.; Holczbauer, T.; Rapi, Zs. *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, e202200112.

## PEROXODISZULFÁT HATÁSA A LÁTHATÓ ÉS UV FÉNNYEL GERJESZTHETŐ FOTOKATALIZÁTOROK AKTIVITÁSÁRA

**Veres Bence, Alapi Tünde**

*Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék,  
6720 Szeged Dóm tér 7-8.*

*veres0629@gmail.com, alapi@chem.u-szeged.hu*

A heterogén fotokatalízis széles körben kutatott módszer, melyet sok egyéb mellett a vízben jelen lévő, biológiailag nem lebontható szerves szennyezők eltávolítására, oxidációjára is használhatunk. Mint minden eljárásnak, a heterogén fotokatalízisnek is nem csak előnyei, hanem hátrányai is vannak. A módszer hatékonysága fokozható a fotogenerált töltések rekombinációjának gátlásával, vagy olyan adalékokkal való kombinációval, melyekből a szerves anyagok átalakításában hatékony reaktív részecskék, gyökök képződnek. A heterogén fotokatalízis során leggyakrabban az oldott  $O_2$  tölti be az elektronbefogó szerepét, a belőle képződő  $O_2^{\bullet-}$  kis reaktivitású, szelektív reakciópartner. Ezzel egyidejűleg a fotogenerált lyukkal való reakciók közvetlenül vagy  $\bullet OH$  képződésén keresztül eredményezik a szerves vegyület átalakulását.

A heterogén fotokatalízis hatékonysága növelhető peroxodiszulfát ionok (PDS) hozzáadásával, melyek részt vehetnek töltésviteli reakciókban, azaz elreagálva a fotogenerált elektronnal belőlük nagy reaktivitású  $SO_4^{\bullet-}$  képződhet. Munkánk során a PDS hatását vizsgáltuk látható fényel is gerjeszthető BiOI, és elsősorban UV fényel gerjeszthető  $TiO_2$  és  $ZnO$  fotokatalizátorok esetén, különböző LED fényforrásokkal való megvilágítás mellett. Modellvegyületként benzokinon, hidrokinon valamint két antibiotikum hatóanyag, a trimetoprim és a szulfametoxipiridazin átalakulását vizsgáltuk.

A PDS a  $ZnO$  és BiOI esetén hatékonyan növelte a modellvegyületek átalakulásának sebességét, azonban  $TiO_2$  esetén ezt a hatást csak  $O_2$ -mentes szuszpenziókban tapasztaltuk. A  $SO_4^{\bullet-}$  képződésének köszönhetően új reakcióutak nyíltak meg, amit jól tükrözött az oldott  $O_2$  szerepének és hatásának szignifikáns változása is. Míg PDS nélküli szuszpenziókban az  $O_2$  szerepe esszenciális az átalakulás szempontjából, addig PDS jelenlétében hatékony bomlást tapasztalunk  $O_2$ -mentes szuszpenziókban is. A képződő gyökök szerepét és hozzájárulását gyökfogók hatásával igazoltuk.

Valódi szennyvizek utókezelése során a mátrix és komponensei jelentősen befolyásolhatják az egyes eljárások hatékonyságát, így méréseinket biológiailag tisztított kommunális szennyvíz mátrixban is elvégeztük. A BiOI esetén a mátrix jelentősen csökkentette a katalitikus aktivitást, ami egyrészt a szervetlen ionok gyökfogó hatásának, másrészt a  $HCO_3^-$ -nak a katalizátor szerkezetére gyakorolt hatásával értelmeztünk.  $ZnO$  esetén a mátrix negatív hatása szintén megnyilvánult, de sokkal kisebb mértékben és jól ellensúlyozható volt a PDS koncentráció növelésével.

A szerzők köszönik az Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) FK132742 számú OTKA pályázat támogatását.

# METTLER TOLEDO

## Megbízható laboratóriumi mérlegek és analitikai eszközök a vezető svájci gyártótól

A METTLER TOLEDO egy globálisan piacvezető vállalat, amely precíziós műszereket gyárt és forgalmaz laboratóriumi felhasználásra és gyártási folyamatokhoz. Világszerte közel 18 ezer munkatárssal, Magyarországon pedig 40 fővel járulunk hozzá partnereink sikeréhez.

Itthon értékesített műszereinkre teljes körű szerviz- és applikációs támogatást biztosítunk, illetve rendszeresen tartunk kihelyezett Helyes Mérési Gyakorlat oktatásokat (tömegmérés, pH, stb).

Elérhetőségeink:

Email: [labor@mt.com](mailto:labor@mt.com)

Telefon: +36 1 288 4040

[www.mt.com](http://www.mt.com)

### Laboratóriumi készülékeink:

- Mikro-, analitikai és precíziós mérlegek
- Automata titrátorok (általános és Karl Fischer)
- pH-, oldottoxigén- és vezetőképesség-mérők
- Termoanalitikai rendszerek (DSC, TGA, TMA, DMA, Hot-stage mikroszkópia)
- Automatizált kémiai megoldások adatgazdag kutatási és fejlesztési kísérletekhez
  - párhuzamos szintézis munkaállomás és laborreaktorok
  - in-situ FTIR rendszer,
  - in-situ Raman rendszer,
  - in-situ szemcseméret és szemcseeloszlás vizsgáló rendszerek,
  - in-situ kamerarendszer
  - felügyelet nélküli automatikus mintavételezési megoldások
- UV/VIS spektrofotométerek
- Egy- és többcsatornás pipetták



METTLER TOLEDO



Termoanalitikai Kiválóság

# METTLER TOLEDO DSC5+

## Az új szabvány

<b>Hőáram és teljesítmény-kompensációs mérési mód 1 készülékben</b>	Egymáshoz közeli effektek hatékony szétválasztásához, vagy gyenge hatások pontos méréséhez
<b>Szabdalmaztatott elektromos hőáram-beszabályozás</b>	Nincs szükség minta előkészítésre és referenciára, miközben kiváló mérési pontosságot érhet el
<b>Innovatív robot gázöblítéses mintakamrával</b>	96 minta- és 7 referenciatégely pozíció, cserélhető referenciák, érzékeny minták védelme a környezeti hatásoktól

**METTLER TOLEDO**

Felkeltette az érdeklődését?  
Kérjen DEMO-t:

► [www.mt.com/contacts](http://www.mt.com/contacts)