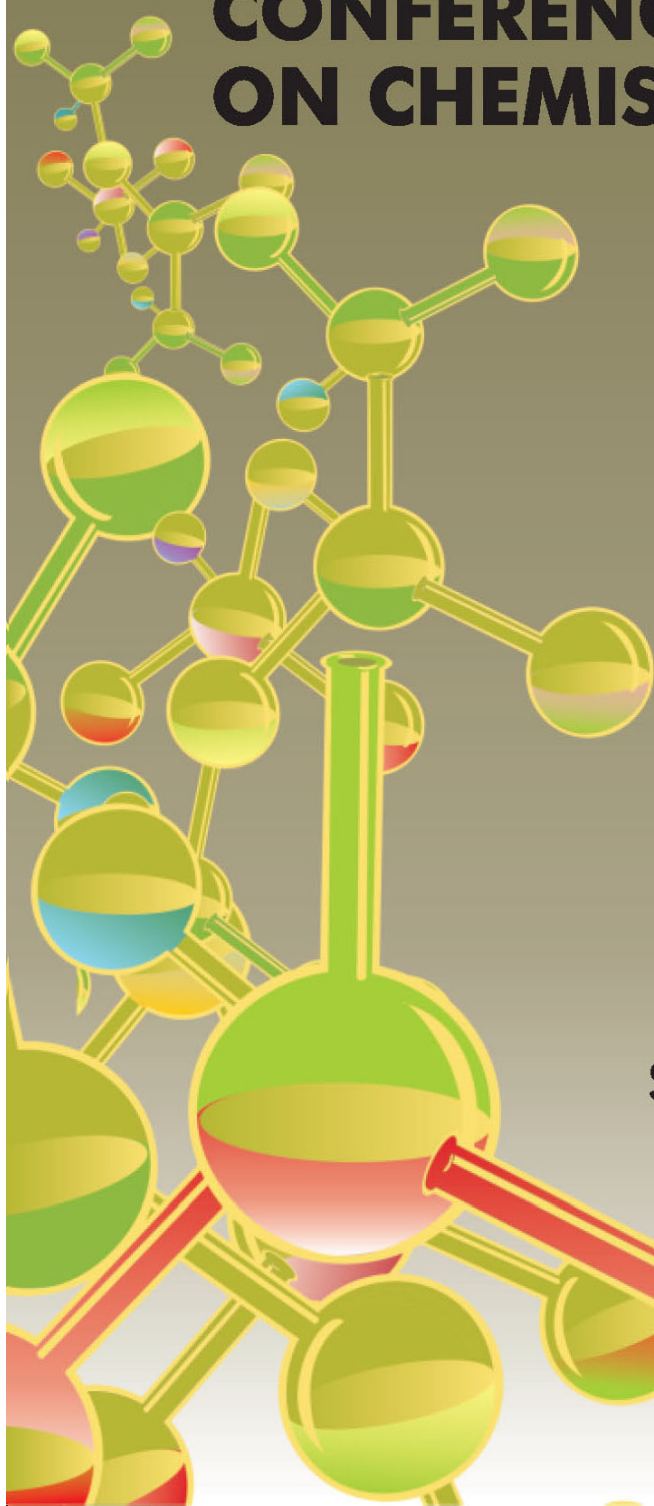


XXIV. NEMZETKÖZI VEGYÉSZKONFERENCIA

24TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON CHEMISTRY



**Szovátafürdő, 2018. október 24–27.
Sovata Băi, October 24–27, 2018**

24th International Conference on Chemistry

XXIV. Nemzetközi Vegyészkonferencia

**Sovata Băi, October 24-27, 2018
Szovátafürdő, 2018. október 24-27.**

Publisher / Kiadó

Hungarian Technical Scientific Society of Transylvania
Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT)

Editor / Szerkesztő

MAJDIK Kornélia

Desktop Publishing / Nyomdai előkészítés

PROKOP Zoltán, Cluj-Napoca / Kolozsvár

Print / Nyomtatás

INCITATO Cluj-Napoca / Kolozsvár

Sponsors / Támogatók



Bethlen Gábor Found – Budapest
Bethlen Gábor Alapkezelő Zrt. – Budapest



Democratic Alliance of Hungarians in Romania
Romániai Magyar Demokrata Szövetsége

Organizer / A konferencia szervezője

Hungarian Technical Scientific Society of Transylvania
Chemistry Department
Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság
Kémia Szakosztály

Cooperative Partners / Együttműködő partnerek



Hungarian Chemical Society, Budapest
Magyar Kémikusok Egyesülete, Budapest



Hungarian Natural Science Society, Budapest
Magyar Természettudományi Társulat, Budapest

Chairman / A konferencia elnöke

MAJDIK Kornélia

Scientific committee / A konferencia tudományos bizottsága

MAJDIK Kornélia

Babeş-Bolyai University, Cluj-Napoca, Hungarian Institute of Chemistry and Chemical Engineering / BBTE, Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet, Kolozsvár, RO

NOVÁK Lajos

Budapest University of Technology and Economics, Department of Organic Chemistry and Technology / BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, HU

KILÁR Ferenc

University of Pécs, Medical School, Institute of Bioanalysis / PTE ÁOK, Bioanalitikai Intézet, HU

ZSUGA Miklós

University of Debrecen, Department of Applied Chemistry / Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék, HU

DIBÓ Gábor

Selye János University, Teacher Training Faculty, Department of Chemistry, SK
Selye János Egyetem, Tanárképző Kar, Kémia Tanszék, SK

HÓRVÖLGYI Zoltán

Budapest University of Technology and Economics, Department of Physical Chemistry and Materials Science / BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, HU

HUSZTHY Péter,

Budapest University of Technology and Economics, Department of Organic Chemistry and Technology / BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, HU

KÉKEDY-NAGY László

Babeş-Bolyai University, Cluj-Napoca, Hungarian Institute of Chemistry and Chemical Engineering / BBTE, Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet, Kolozsvár, RO

Tartalomjegyzék / Content

Plenáris előadások / Plenary Presentations

Biokonjugátumok – összefogás – közös Bioconjugates – Cooperation – Common Good <i>HUDE CZ Ferenc</i>	14
Peptidek posztranszlációs módosítása – kémiai úton Posttranslational Modification of Peptides – in a Chemical Way <i>TÓTH Gábor</i>	16
Mikrohullámú besugárzás és katalízis a szerves foszforvegyületek szintézisében Microwave Irradiation and Catalysis in Organophosphorus Chemistry <i>KEGLEVICH György, KISS Nóra Zsuzsa, BÁLINT Erika, HENYECZ Réka, GRÜN Alajos, MUCSI Zoltán</i>	17
Mi van egy molekulában: atommagok és elektronok egymásközt; A Szomolyai függvény módszere a kémiai kötések értelmezésére What is in a Molecule: Interacting Nuclei and Electrons; The Somoyai Function Approach to the Analysis of Chemical Bonding <i>MEZEY Pál</i>	18

Doktorandusz plénum / Ph.D. Students Plenary Presentations

A szintézis idő módosításának hatása BiOX (X = Cl, Br, I) anyagok morfológiájára és fotokatalitikus aktivitására The Effect of the Synthesis Duration on the Morphology and Photocatalytic Activity of BiOX (X = Cl, Br, I) Materials <i>BÁRDOS Enikő, KIRÁLY Anna Krisztina, PAP Zsolt, BALAI Lucian, GARG Seema, ÁBRAHÁM Imre, HERNÁDI Klára</i>	19
Átmenetifémek szalén/szalan komplexeinek előállítása és alkalmazása Suzuki-Miyaura kapcsolásban Transition Metal Complexes of Tetrahydrosalen Ligands and their Catalytic Properties in C-C cross-coupling Reactions <i>BUNDA Szilvia, UDVARDY Antal, VORONOVA Krisztina, KOVÁTS Éva, KATHÓ Ágnes, JOÓ Ferenc</i>	20
Indolo-karbazol származékok szintézise és jellemzése Synthesis and Characterization of Indolo-carbazole Derivatives <i>DORNER Norbert-Zsolt, GÁL Emese, SILAGHI-DUMITRESCU Luminița, HISSLER Muriel</i>	21
Réz-alapú félvezetők előállítási paramétereinek szabályozása Controlled Synthesis of the Copper-based Photocatalysts <i>FODOR Szilvia, PAP Zsolt, BALAI Lucian, HERNÁDI Klára</i>	22
Enantiomer tiszta aminok előállítása C γ - ω -transzaminázal Enantiopure Amine Synthesis with C γ - ω -transaminase <i>GÁL Cristian Andrei, VARGA Andrea, BENCZE László Csaba, TOȘA Monica Ioana, PAIZS Csaba</i>	23
Jód-benzol származékok aminokarbonilezése amino-tiazolokkal és amino-tiadiazolokkal mint nukleofilekkel Aminothiazoles and Aminothiadiazoles as Nucleophiles in Aminocarbonylation of Iodobenzene Derivatives <i>GERGELY Máté, KOLLÁR László</i>	24
Szénegömb segítségével szintetizált nagy fotokatalitikus aktivitású titán-dioxid üreges szerkezetek előállítása Preparation of Carbon Sphere-based Titanium Dioxide Hollow Structures with High Photocatalytic Activity <i>GYULAVÁRI Tamás, VERÉB Gábor, PAP Zsolt, HERNÁDI Klára</i>	25
Lantanoidákkal dópolt NaYF ₄ -TiO ₂ -Au kompozitok előállítása és fotokatalitikus vizsgálata Preparation of Lanthanide Doped NaYF ₄ -TiO ₂ -Au Composites and their Photocatalytic Activity <i>HAMPEL Boglárka, PAP Zsolt, HERNÁDI Klára, Lucian BALAI</i>	26
1,2,3-triazolil linkert tartalmazó cinkona-kalkon hibridek szintézise és daganatellenes hatása Synthesis and Anti-cancer Activity of Cinchona-chalcone Hybrids with 1,2,3-triazolyl Linkers <i>JERNEI Tamás, DURÓ Cintia, DEMBO Antonio, TAKÁCS Angéla, LAJKÓ Eszter, LÁNG Orsolya, KÖHIDAI László, OLÁHNÉ SZABÓ Rita, BÓSZÉ Szilvia, MEZŐ Gábor, CSÁMPAI Antal</i>	27

Grignard-reagensz kalciumszármazékokra történő heterogén katalitikus 1,4-addíciója Heterogenous Catalytic 1,4-addition of Grignard-reagents to Chalcones JUHÁSZ Kinga, HELL Zoltán.....	28
Kationos színezékek adszorpciója ortorombos α -MoO ₃ -on Adsorption of Cationic Dyes on Orthorhombic α -MoO ₃ KEDVES Endre-Zsolt, RAVASZ Alpár, PAP Zsolt, HERNÁDI Klára, Lucian BALA.....	29
A Dinárokban kialakult Föhn hatása a Krassó-Szörény megyében begyűjtött esővíz ionkompozíciójára The Dinaric Alps Föhn effect on the Ionic Composition of Rainwater Collected in Caras-Severin County, Romania KERESZTESI Ágnes, SZÉP Róbert, BOGA Réka, BODOR Zsolt, TONK Szende, Ion-Andrei NITA.....	30
Domino gyűrűzárási reakciók O,N-heterociklusok előállítására Domino Cyclization Reactions for the Preparation of O,N-Heterocycles KIRÁLY Sándor Balázs, KAJTÁR Mihály, KOVÁCS Tibor, MÁNDI Attila, ANTUS Sándor, KURTÁN Tibor.....	31
Fejlesztési lehetőségek ipari szennyvízkezelésre a BorsodChem Zrt. TDI üzemében a nitrát anion koncentrációjának csökkentése céljából Development Option for Industrial Waste Water Treatment at BorsodChem Ltd. TDI Plant in Order to Decrease the Nitrate anion Concentration KORBÁCS Ákos, SZABÓ Éva, MARKÓ Árpád, FODOR Károly, FARKAS László.....	32
Reverzibilis kémiai hidrogéntárolás irídium-komplexekkel Reversible Chemical Hydrogen Storage Using Iridium Complexes KOVÁCS Henrietta, PAPP Gábor, PURGEL Mihály, KATHÓ Ágnes, JOÓ Ferenc, HORVÁTH Henrietta.....	33
DFT számítások sztereokémiai és sztereoselektivitás meghatározására DFT Calculations for Determination of Stereochemistry and Stereoselectivity KOVÁCS Tibor, KIRÁLY Sándor, TÓTH László, SZAPPANOS Ádám, ANTUS Sándor, KURTÁN Tibor, MÁNDI Attila.....	34
Királis tioéter-amin ligandumok szintézise és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata Chiral Thioether-amine Ligands: Synthesis and Application in Catalysis MAJOR Máté Miklós, RÖVID Gergő, LENDVAY György, BÉNYEI Attila, BAKOS József, FARKAS Gergely.....	35
Kondo-csúcs felhasadása grafén kontaktusokhoz csatolt kvantumpöttyben Splitting of the Kondo Peak in a Quantum Dot Attached to Graphene Contacts MÁTHE Levente, Ioan GROSU.....	36
Imidazolium-alapú ionfolyadékok alkalmazása fehérjék elválasztására kapilláris zónaelektroforézis módszerrel Application of Imidazolium-based Ionic Liquids in the Separation of Proteins by Capillary Zone Electrophoresis MEZŐ Emerencia, PÁGER Csilla, MAKSZIN Lilla, KILÁR Ferenc.....	37
Termesztett gombafajok, illetve fajták összehasonlító vizsgálata klasszikus és noninvazív kémiai módszerrel Comparative Analysis of Cultivated Mushroom Species and Varieties by NIR Spectrometry and Classical Analytical Method MIKOLA Erika, FODOR Marietta.....	38
Aril-etinil-porfirin származékok szintézise, szerkezet- és fotofizikai tulajdonságaik vizsgálata Synthesis, Characterization and Photophysical Properties of Aryl-ethynyl-porphyrins MOLNÁR Éva-Andrea, GÁL Emese, BRÉM Balázs, Luminița SILAGHI-DUMITRESCU.....	39
A <i>Saccharomyces cerevisiae</i> ferulinsav dekarboxiláz (ScFDC1) szubsztráttartományának vizsgálata Exploring the Substrate Scope of Ferulic Acid Decarboxylase (FDC1) from <i>Saccharomyces Cerevisiae</i> NAGY Emma Aletta Zsófia, NAGY Csaba Levente, TÓTÓ Róbert, PAIZS Csaba, BENCZE László Csaba.....	40
Multisztereogén, új típusú cinkona (tio)négyszetamid organokatalizátor szintézise és alkalmazása Synthesis and Application of New Type Multistereogenic Cinchona (thio)squaramide Organocatalysts NAGY Sándor, DARGÓ Gyula, KISSZEKELYI Péter, SIMON András, MÁTRAVÖLGYI Béla, BARABÁS Júlia, HÖLTZL Tibor, HUSZTHY Péter, KUPAI József.....	41
Nekroptózist moduláló humán fehérjék bioszintézise Biosynthesis of Necroptosis Modulating Human Proteins SALAMON Pál, NAGY Katalin, KOVÁCS Zita, ALBERT Beáta, MIKLÓSSY Ildikó, LÁNYI Szabolcs, ORBÁN Csongor-K.	42

Fenol fotokatalitikus bontása egy $\text{TiO}_2/\text{WO}_3/\text{Au}$ kompozitrendszerben. Hatékonyság és köztermék predikció Photodegradation of Phenol in a $\text{TiO}_2/\text{WO}_3/\text{Au}$ Photocatalyst System. Efficiency and Degradation Intermediate Prediction SASZET Kata, PAP Zsolt, Vasile Mircea CRISTEA, Lucian BAIA	43
Spiro-cikloalkil-piridazinonok szintézise Synthesis of Spiro-cycloalkyl-pyridazinones SEPSEY FÜR Csilla, SZIGETVÁRI Áron, DÉKÁNY Miklós, HERCZEG Barbara, GERENCSE János, MAKARA Gergely, HAZAI László, KEGLEVICH György, BÖLCSKEI Hedvig	44
Koronaéter alapú fluoreszcens szenzormolekulák szintézise és vizsgálata Synthesis and Studies of Crown Ether Based Fluorescent Sensor Molecules SZABÓ-SZENTJÓBI Hajnalka, MÁRTON Anna, PÁL Dávid, TÓTH Tünde, HUSZTHY Péter	45
A CCMV kapszidfehérje klónozása, heterológ expressziója és molekuláris dinamikai szimulációja Cloning, Heterologous Expression and Molecular Dynamics Simulation of the CCMV Capsid Protein SZÖVÉRFI János, ORBÁN Kálmán-Csongor, LÁNYI Szabolcs, FEJÉR Szilárd	46
Kitozán bevonatok permeabilitásának vizsgálata nedvesedési és impedancia spektroszkópiai módszerekkel cink hordozókon Characterizing the Permeability of Chitosan Coatings on Zinc by Wetting and Impedance Spectroscopy Studies SZŐKE Árpád Ferenc, SZABÓ Gabriella Stefánia, Liana Maria MUREȘAN, ALBERT Emőke, HÓRVÖLGYI Zoltán	47
Triszubsztituált 4- és 5-karboxamido-triazolok szintézise cikloaddíción és aminokarbonilezési reakciókban Synthesis of 4- and 5-carboxamidotriazoles Via Azide-alkyne cycloaddition–aminocarbonylation Sequence SZUROCZKI Péter, SÁMSON Judit, KOLLÁR László	48
Fényfüggő változások a búza szabad aminosav anyagcseréjében Light-dependent Changes in Free Amino Acid Metabolism of Wheat TOLDI Dávid, KOCSY Gábor, SIMONNÉ SARKADI Livia	49
Kommunális szennyvíztisztítás hatékonyságának növelése különböző szabályozási stratégiák alkalmazásával: matematikai modellezés és szimuláció Increasing the Efficiency of Municipal Wastewater Treatment by Different Control Strategies: Mathematical Modelling and Simulation VÁRHELYI Melinda, CRISTEA Vasile-Mircea, BREHAR Marius	50
Az ózon és Fenton-reakció hatásának vizsgálata valós tejipari szennyvizek membránszűrése során Investigation of the Effect of Ozone and Fenton Reaction on Membrane Filtration of Real Dairy Wastewater ZAKAR Mihály, FARKAS Dániel Imre, KESZTHELYI-SZABÓ Gábor, HANCZNÉ-LAKATOS Erika, LÁSZLÓ Zsuzsanna	51

Szekció-előadások / Section Presentations

Alkalmazott kémia / Applied Chemistry

A keverő típusú előmelegítők alkalmazásának előnyei a nagy teljesítményű erőművi blokkok tápvíz-előmelegítésénél Advantages of Using Direct Contact Feedwater Heaters in High Performance Steam Power Plants ÁRPÁD István	52
Új típusú Diels-Alder adduktot tartalmazó poliuretánok Polyurethanes Containing New Type Diels-Alder Adduct CZIFRÁK Katalin, LAKATOS Csilla, KARGER-KOCSIS József, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor	53
Módosított gumibitumen, mint SMA alapanyag nagyterhelésű alkalmazásokra Modified Rubber Bitumen as an SMA Feedstock For Heavy Duty Application GERGÓ Péter, KÁROLY Balázs, GEIGER András, HOLLÓ András	54
Hozzájárulások az élelmiszeripari etilalkoholos erjesztés kinetikai paramétereinek meghatározásához és a matematikai modellek tökéletesítéséhez a tervezés és működtetés fejlesztése céljából Contributions to the Determination of Ethanol Fermentation Kinetic Parameters in the Food Industry and Mathematical Model Improvement for Design and Operation Development GOMBOS Sándor	55

Molekulaszerkezetében nagy hidrogéntartalmú középdesztillátumok előállítása Production of Middle Distillates with High Hydrogen Content in the Molecular Structure <i>HOLLÓ András, HANCSÓK Jenő, TÓTH Orsolya, VISNYEI Olivér, SÁROSSY Gábor</i>	56
Amino-izocianoakridin származékok, mint potenciális sejtjelölők Amino-isocyanoacridines as Potencial Cell Probes <i>KOVÁCS Sándor Lajos, NAGY Miklós, RÁCZ Dávid, NAGY Zsolt László, BANKÓ Csaba, BACSÓ Zsolt, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	57
Vegyí anyagok gyors detektálása egészségügyi és higiéniai termékekben valós idejű közvetlen analízis ionizációs tömegspektrometriával (DART-MS) Rapid Mapping of Various Chemicals in Personal Care and Healthcare Products by Direct Analysis in Real Time Mass Spectrometry (DART-MS) <i>KUKI Ákos, ZELEI Georgina, NAGY Lajos, NAGY Tibor, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	58
Poli(ω -pentadecalakton) építőelemet tartalmazó poliuretánok előállítása és vizsgálata Preparation and Investigation of Polyurethanes Containing poly(ω -pentadecalactone) Building Blocks <i>LAKATOS Csilla, CZIFRÁK Katalin, KOVÁCS István Gergő, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	59
Csontszövet regenerálódása réz tartalmú bioaktív üvegek felhasználásával Copper Containing Bioactive Glasses for Bone Tissue Regeneration Trials <i>MAGYARI Klára, Radu A. POPESCU, PAP Zsolt, KÁSA Zsolt, TÓTH Zsejke-Réka, Adriana VULPOI, Marian TÁULESCU, Sidonia BOGDAN, Alexandra DREANCĂ, Cristina LELESCU, Emilia LICARETE, Dan C. VODNAR, Ionel PAPUC, HERNÁDI Klára, Lucian BAIA</i>	60
A 2,6-toluilén-diizocianát alkoholokkal történő reakciójának kinetikai vizsgálata katalizátor nélkül és katalizátor jelenlétében Reactions of 2,6-Toluene Diisocyanate with Alcohols: Kinetic Studies in the Absence and Presence of Catalysts <i>NAGY Lajos, NAGY Tibor, KUKI Ákos, OLÁH Réka, LAKATOS Csilla, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	61
Rendkívül kis molekulatömegű, Izocianonaftalin alapú fluoreszcens szolvatokróm festékek analitikai alkalmazása Higany(II) és Ag(I) egyidejű, szelektív kimutatására Isocyanonaphthalenes as Extremely Low Molecular Weight Selective, Ratiometric Fluorescent Probes for Both Mercury(II) and Silver (I) <i>NAGY Miklós, RÁCZ Dávid, KOVÁCS Sándor Lajos, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	62
Tömegmaradék analízis, robosztus módszer kopolimerek tömegspektrumának elemzésére Mass-Remainder Analysis: A Robust Method for Evaluation of Copolymer Mass Spectrum <i>NAGY Tibor, KUKI Ákos, NAGY Lajos, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	63
Félvezető oxidok töltésszeparáción alapuló környezeti alkalmazhatósága: játék az elektronokkal egy tisztább környezetért Semiconductor Oxides Applicability Based on Their Charge Separation Properties: Playing With the Electrons for a Cleaner Environment <i>PAP Zsolt</i>	64
Szolvatokróm amino-izocianoantracén és -akridin származékok mint fiziológiás pH-érzékelők és bioszenzorok Amino-isocyanoacridines: Solvatochromic Fluorophores as Physiological pH Probes and Biosensors <i>RÁCZ Dávid, NAGY Miklós, KOVÁCS Sándor Lajos, NAGY Zsolt László, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	65

Analitikai kémia / Analytical Chemistry

„Természetes” édesítőszer D- és L-fruktóz tartalmának vizsgálata polarimetriával és nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiával Investigation of the D- and L-fructose Content of “Natural” Sweeteners by Polarimetry and High Performance Liquid Chromatography <i>CSAPÓ János, ALBERT Csilla, KISS Dóra</i>	66
A taumatin édesítőszer hamisítása, és ennek kimutatására alkalmas analitikai módszerek Thaumatococcus Adulteration and the Analytical Methods for deTecton of Thaumatococcus Counterfeiting <i>CSAPÓ János, ALBERT Csilla, KISS Dóra</i>	67

Fizikai kémia / Physical Chemistry

Új típusú ligandumok és komplexeik a vizes közegű fémorganikus katalízisben New Ligands and Complexes in Aqueous Organometallic Catalysis <i>JOÓ Ferenc, KATHÓ Ágnes, HORVÁTH Henrietta, PAPP Gábor, UDVARDY Antal</i>	68
Hangyasav bontása vízzoldható Ir-katalizátorral H-akceptor jelen- és távollétében Decomposition of Formic Acid with Water-soluble Ir-catalyst in the Presence and Absence of H-acceptor <i>KATHÓ Ágnes, HANKÓ György, ÖLVETI Gábor, UDVARDY Antal, PAPP Gábor, JOÓ Ferenc</i>	69
Foszfa-urotropin (PTA) módosítása oldószermentes közegben Ball-milling Derivatization of Phospha-urotropine (PTA) Under Solvent-free Conditions <i>UDVARDY Antal, SZOLNOKI Csenge Tamara, JOÓ Ferenc, KATHÓ Ágnes</i>	70

Gyógyszerkémia / Pharmaceutical Chemistry

Na _v 1.7 altípusú feszültségfüggő nátrium csatorna blokkolók szintézise Synthesis of Voltage Gated Na _v 1.7 Sodium Channel Blockers <i>BŐLCSKEI Hedvig, KOCSIS Pál, KOLOK Sándor, TARNAWA István</i>	71
„Molekula halászat. Mi marad a hálóban?” Esettanulmányok a ligand-alapú virtuális és <i>in vitro</i> biológiai szűrés integrált alkalmazására „Ligand Fishing. What Stays in the Net?” Case Studies for the Integrated Use of Ligand-based Virtual and <i>In Vitro</i> Biological Screening <i>DORMÁN György, HAJDÚ István, FLACHNER Beáta, DOBI Krisztina, SZASZKÓ Mária, MAGYAR Csaba, LŐRINCZ Zsolt, CSEH Sándor</i>	72

Műanyag- és gumiipari kémia / Plastic and Rubber Chemistry

Átmenetifémekkel módosított katalizátorok alkalmazása műanyag hulladékok pirolízise során: szintézisgáz előállítása Transition Metal Modified Catalysts for the Pyrolysis of Waste Plastics: Syngas Production <i>GOMBOR Linda, AL-ASADI Mohammed, MISKOLCZI Norbert</i>	73
---	----

Szerves kémia / Organic Chemistry

Királis információkban gazdag, funkcionizált telített heterociklusok sztereokontrollált szintézisei gyűrűnyitó metatézissel Stereocontrolled Access to Diolefinated Saturated Heterocycles with Multiple Stereogenic Centers Through Ring-opening Metathesis <i>BENKE Zsanett, NONN Melinda, KISS Loránd</i>	74
Multivalens szénhidrátok szintézise és lektinekkel való kölcsönhatásának vizsgálata Synthesis of Multivalent Carbohydrates and Investigation of their Interaction With Lectins <i>CSÁVÁS Magdolna, Lenka MALÍNOVSKÁ, Gita JANCARIKOVÁ, LE THAI Son, HERCZEG Mihály, E. KÖVÉR Katalin, Michaela WIMMEROVÁ, BORBÁS Anikó</i>	75
Kén és szelén tartalmú szénhidrátszármazékok előállítása és biológiai vizsgálatuk Syntheses of Sulfur and Selenium Containing Carbohydrates and Their Biological Studies <i>ILLYÉS Tünde Zita, E. KÖVÉR Katalin, FEHÉR Krisztina, Ambati Ashok KUMAR, Hans-Joachim GABIUS, Jorge GONZÁLES, Marcelo COMINI, SZILÁGYI László</i>	76
Fluortartalmú piperidinvázis γ -aminosavszármazékok szintézisei A Convenient Synthesis of Fluorine-containing Piperidine γ -amino Acid Derivatives <i>OUCHAKOUR Lamiaa, ÁBRAHÁMI Renáta Anita, NONN Melinda, KISS Loránd</i>	77
Glioximokkal képzett új Fe(II)-komplexe szintézise, és a ligandumok hatása a fizikai-kémiai tulajdonságokra Syntheses of Novel Fe(II)-glyoxime Complexes, and Influence of Ligands on Physical-Chemical Properties <i>ifj. VÁRHELYI Csaba, KUZMANN Ernő, SZALAY Roland, POKOL György, MIHÁLY Judith, SZABÓ Pál, GOGA Firuța, GOLBAN Ligia-Mirabela, HUSZTHY Péter, VÁRHELYI Melinda</i>	78

Szervetlen kémia / Inorganic Chemistry

1,4-Benzokinon reakciói heterogén fotokatalitikus rendszerekben Reactions of 1,4-benzoquinone in Heterogeneous photocatalytic Systems FÖNAGY Orsolya, SZABÓNÉ BÁRDOS Erzsébet, HORVÁTH Ottó, KISS Gyula	79
---	----

Posztterek / Posters

Nanoméretű TiO ₂ előállítása természetes rutil őrlésével The Production of Nanoscale TiO ₂ by Nanogrinding of Natural Rutile ALMÁSI Enikő Eszter, RÁCZ Ádám, PAP Zsolt, BOHÁCS Katalin, GREGUS Éva, HALYAG Nóra	80
A Hansen oldódási paraméterek összehasonlítása metanol és víz-etanol elegyekre Comparison of the Values of Hansen Solubility Parameters for Methanol and Water-ethanol Mixtures ANDRÁS Csaba Dezső, MOLNOS Éva, MÁTYÁS László	81
Anyagcseremérnökségben alkalmazható dehidrogenáz enzimek vizsgálata Studies of Dehydrogenases Applicable in Metabolic Engineering ANTAL Emőke, BALÁZS Márta, SINKLER Réka, BODOR Zsolt, MIKLÓSSY Ildikó	82
A <i>Basfia succiniciproducens</i> bioszintetikus potenciáljának tanulmányozása Studies on the bioSynthetic Potential of <i>Basfia Succiniciproducens</i> BALÁZS Márta, BARTOS Hunor, ANTAL Emőke, MIKLÓSSY Ildikó, BODOR Zsolt	83
Silóból származó antagonistá baktériumok által termelt antimikrobiális vegyületek Antifungal Compounds in Case of Antagonistic Silage Bacteria BECZE Annamária, VINCZE Éva Boglárka, ALBERT Csilla, MARA Gyöngyvér	84
MDA gyártás előállítási lépéseinek tanulmányozása laboratóriumi körülmények között Studying the Reaction Steps of MDA Production under Laboratory Conditions BOROS Renáta Zsanett, TOBOZ Lilla, HARNÓCZ Lilla, BERECS Sándorné, STOMP Dávid, VARGA István, FARKAS László	85
Membráncellás klórgyártás vegyszeripari maradékainak környezetbarát semlegesítése, anyagában történő újrahasznosítása Eco-friendly Neutralization of Chemical Industrial Residues of Membrane Cell Chlorine Production and Waste Recycling BÓDAY Ádám, DARABOS Viktor, FARKAS László, JAKAB-NÁCSA Alexandra, KAPTAY György, MOGYORÓSI András, STOMP Dávid, SZABÓ Dávid, SZŐRI Milán, VISKOLCZ Béla	86
Difluoroboránok szintézise és szerkezetvizsgálata Synthesis and Structural Characterization of Difluoroboron Complexes BRÉM Balázs, GÁL Emese, GÁINÁ Luiza-Ioana, CRISTEA Castelia	87
Vízoldható ruténium-nanorészecskék előállítása és alkalmazása arének vizes-szerves kétfázisú hidrogénezési reakciójában Synthesis of Water-soluble Ruthenium Nanoparticles (Ru-NPs) and their Application in the Aqueous Biphasic Hydrogenation of Arenes CSÁSZÁR Zsófia, GULYÁS Henrik, BAKOS József, FARKAS Gergely	88
HPLC metodikafejlesztés a triptofán és metabolitjainak mérésére HPLC Method Development for the Assessment of Tryptophan and its Metabolites CSEH Edina Katalin, VERES Gábor, VÉCSEI László, ZÁDORI Dénes	89
Kelát- és hídképző N-heterociklusos karbén ligandumok átmenetifém komplexeinek előállítása és szerkezetvizsgálata Synthesis and Structural Investigation of Transition Metal Complexes Using Chelating and Bridging N-heterocyclic Carbene Ligand Precursors CZÉGENI Csilla Enikő, UDVARDY Antal, DE Sourav, KATHÓ Ágnes, JOÓ Ferenc	90
Mesterséges és természetes hidroxipatit adalékokból előállított bioüvegkerámiák vizsgálata Synthesis and Characterization of Bioactive Glass-ceramics Containing Synthetic and Biological Hydroxiapatite ENISZNÉ BÓDOGH Margit, CZÉDLI Diána	91

Bórral és bizmuttal módosított heterogén fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata Preparation and Study of Boron and Bismuth Co-doped Heterogeneous Photocatalysts FONYÓ Máté, KULCSÁR Petra, SZABÓNÉ BÁRDOS Erzsébet, HORVÁTH Ottó, ZSIRKA Balázs, KRISTÓFNÉ MAKÓ Éva, DOBRÁDI Annamária, JUZSAKOVA Tatjana	92
Újszerű diimin-alapú rézkomplexek kialakítása és használatuk fotoredox katalizátorként Design of Novel Diimine-based Copper Complexes and Their Application as Photoredox Catalysts FÖLDESI Tamás, NAGY Bálint, ADAMIK Réka, SIPOS Gellért, NOVÁK Zoltán	93
Bioetanol cukornádból történő előállításánál visszamaradt szilárd hulladék hagyományos pirolízise Conventional Pyrolysis of Solid Wastes Biomass Obtained from Sugar Cane Bioethanol Industry GÁL Emese, SAUCIUC Anca, BRÉM Balázs, MOLNÁR Éva-Andrea	94
Au, Pt/TiO ₂ alapú kompozitok fotokatalitikus aktivitásának és ökotoxikológiai hatásának vizsgálata Investigating the Photocatalytic Activity and Ecotoxicology of Au, Pt/TiO ₂ Composite Photocatalysts HAMPEL Boglárka, KOVÁCS Gábor, CZEKES Zsolt, HERNÁDI Klára, PAP Zsolt	95
Királis vegyületek elválasztása során kialakuló kölcsönhatások elméleti hátterének vizsgálata HPLC és SFC módszerek alkalmazásával Investigation of the Theoretical Background of Interactions in the Separation of Chiral Compounds Using HPLC and SFC Methods HORVÁTH Éva, RÉDEI Csanád, BOROS Borbála, FELINGER Attila	96
Gyulladás csökkentő és reuma elleni kenőcs fejlesztése és vizsgálata The Development and Analysis of an Ointment for Inflammation Reduction and Reuma Treatment JURCA Tünde, MARIAN Eleonora, PALLAG Annamária, VICAS Laura, SUCIU Ramona Nicoleta, BÁCSKAY Ildikó, FEHÉR Pálma	97
Szén nanocsövek alkalmazása a környezetvédelemben Carbon Nanotubes for Environmental Mitigation JUZSAKOVA Tatjana, AL-JAMMAL Noor, CREȚESCU Igor, DOMOKOS Endre, CSAVDÁRI Alexandra	98
Funkcionális aldehid deformiláz enzimmodellek előállítása Production of Functional Aldehyde Deformylase Enzyme Models KAIZER József, KRIPLI Balázs, TÖRÖK Patrik	99
Magnézium-oxiddal módosított TiO ₂ fotokatalizátorok előállítása és aktivitásuk vizsgálata Synthesis and Characterization of Magnesium-oxide Doped TiO ₂ Photocatalyst KOCIS Gábor, SZABÓNÉ BÁRDOS Erzsébet, HORVÁTH Ottó, ZSIRKA Balázs, KRISTÓFNÉ MAKÓ Éva, DOBRÁDI Annamária, JUZSAKOVA Tatjana	100
A humán FER tirozin kináz molekuláris klónozása és heterológ expressziója Molecular Cloning of Human Tyrosine Kinase FER and Heterologous Expression KOVÁCS Zita, ALBERT Beáta, ORBÁN Kálmán-Csongor, NAGY Katalin, SALAMON Pál, LÁNYI Szabolcs	101
A ZnO/Pt/redukált grafit-oxid hármas kompozit fotokatalizátorok előállítása és összehasonlítása kémiai redukciós és impregnálás módszerrel Comparison of ZnO/Pt/rGO Ternary Composites Synthesized by Chemical Reduction with Multistep Impregnation and One-pot Synthesis Method KOVÁCS Zoltán, FODOR Szilvia, POP Lucian-Cristian, PAP Zsolt	102
Ikerionos állófázisok túlterheléses vizsgálata Overloading Study of Zwitterionic Stationary Phases KULÁGIN Renáta, BACSKAY Ivett, LINDNER Wolfgang, FELINGER Attila	103
Makardij-modell fermentlevek ultraszűrésénél Makardij-Model of Ultrafiltered Fermentation Liquids LEMMER Balázs, SZPISJÁK-GULYÁS Nikolett, JÁKÓI Zoltán, KERTÉSZ Szabolcs, HODÚR Cecília	104
Titán dioxid fotokatalitikus aktivitásának vizsgálata <i>E. coli</i> esetében The Effect of Titania on <i>E. Coli Bacteria</i> LUKÁCS Alexandra, MÁTYÁS Eszter, SASZET Kata, PAP Zsolt, CZEKES Zsolt, PAPP Judit	105
Ioncsere vizsgálata magas nátrium-klorid tartalmú közegben Examination of Ion Exchange Capacity from High Sodium-Chloride Solution MIHALKÓ Andrea, HARNÓCZ Lilla, FARKAS László, FODOR Károly, KOVÁCS Gábor, NAGYNÉ BAGÓ Judit, VARGA Krisztina	106

A fekete ribiszkében (<i>Ribes nigrum</i> L.) található antociánok Soxhlet-extrakciós kinetikájának vizsgálata Kinetic Study of Soxhlet Extraction of Anthocyanins from Blackcurrant (<i>Ribes nigrum</i> L.) MIHOK Emőke, ALBERT Csilla, MOLNOS Éva, GYENGE Szidónia, ANDRÁS Csaba Dezső.....	107
Koffein meghatározása teából HPLC-MS/MS módszerrel Determination of Caffeine Content in Tea by Means of HPLC-MS/MS Method MUNTEAN Norbert, SZEREDAI Bettina-Dóra, TÓTÓ Róbert	108
Apoptózist inhibáló fehérjék BIR3 doménjának a bioszintézese, tisztítása és fehérje-fehérje interakciók vizsgálata Biosynthesis, Purification and Protein-protein Interaction Studies of BIR3 Domain of IAP's NAGY Katalin, ORBÁN Csongor-Kálmán, ALBERT Beáta, KOVÁCS Zita, SALAMON Pál, LÁNYI Szabolcs.....	109
A mezei katáng (<i>Cichorium intybus</i>) extraktumok fenolos vegyületeinek és antioxidáns kapacitásának vizsgálata Study of <i>Cichorium intybus</i> (common chicory) Extracts Phenolic Compounds and Antioxidant Property PALLAG Annamária, JURCA Tünde, MARIAN Eleonora, KISS Rita, VICAŞ Laura	110
A platina-ón kötés számításos vizsgálata The Theoretical Investigation of the Platinum-tin Bond PAPP Tamara, KOLLÁR László, KÉGL Tamás	111
Amidinek szintézise palládium-katalizált, <i>tert</i> -butil-izonitril beékelődéssel járó reakciókban Palladium-Catalyzed Synthesis of Amidines via <i>tert</i> -Butyl Isocyanide Insertion PÁLINKÁS Noémi, KOLLÁR László, KÉGL Tamás	112
BiOBr és BiOBr-szén nanocső (CNT) alapú kompozitok <i>in situ</i> előállítása és jellemzése In-situ Synthesis of BiOBr and its Composites with Carbon Nanotubes (CNT) and Their Characterization SHARMA Nikita, PAP Zsolt, ÁBRAHÁM Imre, HERNÁDI Klára	113
Hőkezelés hatása különböző mézfajták kémiai és fizikai tulajdonságára Detection and Analysis of Adulteration of Marketed Honey Adulteration TAMÁS Melinda, TONK Szende.....	114
Biokomponens és Fischer-Tropsch paraffint tartalmazó polimerrel módosított bitumen reológiai vizsgálata Rheological Investigation of Biocomponent and Fischer-Tropsch wax Containing Polymer Modified Bitumen TÁLOSI Gréta, GERGŐ Péter, HOLLÓ András.....	115
Ezüst-halogenid (AgX, X=Cl ⁻ , Br ⁻ , I ⁻) látható fényben aktív fotokatalizátorok stabilitásának a vizsgálata Stability Investigations of Visible Light Silver-halide (AgX, X=Cl ⁻ , Br ⁻ , I ⁻) Photocatalysts TÓTH Zsejke-Réka, KOVÁCS Gábor, PAP Zsolt, HERNÁDI Klára	116
Különböző alakú Au nanorészecskék bioaktív üveggel alkotott kompozitjainak előállítása és jellemzése The Synthesis and Characterization of Bioactive-glass Composites with Different Shaped Gold Nanoparticles TÓTH Zsejke-Réka, Lucian C. POP, MAGYARI Klára, PAP Zsolt, HERNÁDI Klára, Lucian BAIA.....	117
Akridon egységet tartalmazó koronaéter előállítása és alkalmazása szenzormolekulaként Synthesis of a Crown Ether Containing an Acridone Unit and its Application as a Sensor Molecule TÓTH Tünde, GOLCS Ádám, HORVÁTH Viola, BALOGH György Tibor, HUSZTHY Péter	118
Olajemulziók ózonos előkezeléssel intenzifikált ultraszűrésére különböző polimer membránok esetében Pre-ozonation for Intensified Ultrafiltration of Oil-in-water Emulsions in Case of Different Polymer Membranes VERÉB Gábor, VÉGH Júlia, KERTÉSZ Szabolcs, BESZÉDES Sándor, HODÚR Cecília, LÁSZLÓ Zsuzsanna.....	119

Diák-posztterek / Student Posters

Szállópor minták kémiai elemzése a Csíki-medencében Chemical Analysis of Particulate Matter (PM ₁₀) in the Ciuc Basin AKÁCSOS Beáta-Emese, SZÉP Róbert, KERESZTESI Ágnes, BOGA Réka, BODOR Zsolt, TONK Szende, MIKLÓSSY Ildikó	120
Indol és fenotiazin alapú vegyületek szintézise és optikai tulajdonságaik vizsgálata Synthesis of Indole and Phenothiazine Based Compounds and their Optical Properties BARABÁS Laura-Edit, GÁL Emese	121

Fotogenerált elektrontranszfer biológiai (WO ₃ /RC) és szervetlen (WO ₃ /TiO ₂) rendszerekben Photogenerated Electron Transfer in Biological (WO ₃ /RC) and Inorganic (WO ₃ /TiO ₂) Systems BOGA Bíborka, SZÉKELY István, CSEKŐ Richárd, KOVÁCS Gábor, PAP Zsolt, BALAI Monica, HERNÁDI Klára, NAGY László.....	122
mikroRNS-ek poliadenilációjának vizsgálata nanorészecskék jelerősítésén alapuló módszerrel Nanoparticle-amplified Measurements of Polyadenylation of microRNAs BOGNÁR Zsófia, SIMON László Ferenc, GYURCSÁNYI E. Róbert.....	123
A Petroselinum Crispum-ból nyert fenilalanin ammónia-liáz (PcPAL) helyspecifikus immobilizálása The Site-specific Immobilization of Phenylalanine Ammonia-lyase (PAL) from Petroselinum Crispum BOROS Krisztina, MOISA Elena Mădălina, BENCZE László Csaba.....	124
Kurkumin származékok szintézise, szerkezeti és optikai tulajdonságaik vizsgálata Synthesis, Structural and Photophysical Characterization of Curcumin Derivatives BÚS Zoltán-Tamás, GÁL Emese.....	125
McMurry-reakció funkciós csoport toleranciájának vizsgálata szelektíven továbbalakítható Tamoxifen analógok szintéziséen keresztül Investigation of Functional Group Tolerance of McMurry-Reaction Through Synthesis of Tamoxifen Analogues that Can Selectively Modified DURÓ Cintia, JERNEI Tamás, CSÁMPAI Antal.....	126
Réz(I)oxid-nemesfém rendszerek előállítása és jellemzése Synthesis and Characterization of Copper(I)oxide-noble Metal Systems DUSNOKI Daniella, FODOR Szilvia, PAP Zsolt, HERNÁDI Klára.....	127
Fenilalanin ammónia liázok termostabilitásának növelése fehérjemérnökség által Enhancing the Termostability of Phenylalanine Ammonia Lyases Through Protein Engineering HORVÁTH Ilka, Raluca TOMOIAGA, Diana TORK SOUAD, NAGY Csaba Levente, BENCZE László Csaba.....	128
Új típusú β-karbolinok és ferrocén analógok szintézise Synthesis of New Types of β-carbolines and Ferrocene Analogues HUTAI Dániel, FODOR Kinga Judit, CSÁMPAI Antal.....	129
Paramagnetizmus metáلكarboránokban: poliéderez kromadikarborán rendszerek Paramagnetism in Metallocarboranes: The Polyhedral Chromadikarborane Systems JÁKÓ Szabolcs, KUN Attila-Zsolt, Alexandru LUPAN, R. Bruce KING.....	130
CRP assay fejlesztése papír hordozón Developing Paper Based CRP Assay JURÁNYI E. Petra, BERÉNYI Szilvia, GYURCSÁNYI Róbert.....	131
Olajemulziók membránszűrése TiO ₂ /szén-nanocső kompozittal módosított fotokatalitikus membránokkal Membrane Filtration of Oil-in-water Emulsions with TiO ₂ /carbon Nanotube Modified Photocatalytic Membranes KÁLMÁN Viktória, KERTÉSZ Szabolcs, BESZÉDES Sándor, PAP Zsolt, GYULAVÁRI Tamás, HODÚR Cecilia, LÁSZLÓ Zsuzsanna, VERÉB Gábor.....	132
AgBr fotokatalizátorok alkalmazhatósága és szerkezetének befolyásolása Applicability and Structure Modification of AgBr Photocatalysts KISS János, TÓTH Zsejke-Réka, PAP Zsolt, HERNÁDI Klára, KOVÁCS Gábor.....	133
Mutáns specifikus KRAS G12C inhibitorok tesztelése Testing of Mutant Specific KRAS G12C Inhibitors KOPPÁNY Gergely, NYÍRI Kinga.....	134
Vörösiszap szennyezés remediációjának leírása mesterséges neurális hálózatok által. Fitoremediációs esettanulmány vizes környezetben Description of Red Mud Polluted Site Remediation by Means of Artificial Neural Networks. A Case Study for Aqueous Phytoremediation MIHÁLY Norbert-Botond, CSAVDÁRI Alexandra, CRISTEA Vasile-Mircea.....	135
Potenciális melanoma-ellenes, 1,2,5-oxadiazol-típusú hatóanyagjelöltek szintézise Synthesis of Potential Anti-melanoma, 1,2,5-oxadiazole-type Agents RAGÁNYI László, CSÁMPAI Antal.....	136

MoO ₃ hatása az AgBr, BiOI, Cu ₂ O és ZnO fotokatalizátorok aktivitására Effect of MoO ₃ on the Activity of AgBr, BiOI, Cu ₂ O and ZnO Photocatalysts <i>RAVASZ Alpár, KEDVES Endre-Zsolt, TÓTH Zsejke-Réka, BÁRDOS Enikő, FODOR Szilvia,</i> <i>KOVÁCS Zoltán, PAP Zsolt, HERNÁDI Klára, Lucian BAIA</i>	137
NIR fluoreszcens jelzővegyületek előállítása és fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata Synthesis and Photophysical Properties of NIR Fluorescent Dyes <i>SISA Rihárd, GÁL Emese, BRÉM Balázs</i>	138
Grafén alapú térvezérlésű tranzisztor vizsgálata a p-n átmenet képzési folyamatában Analysis of Electrical Characteristics for Graphene Field Effect Transistor with Graphene p-n Junction Formation Process <i>SZABÓ Róbert, SO-YOUNG Kim, JEON EUN Ki, JEONG GYEONG Jun, BYOUNG Hun Lee</i>	139
Halogénezett aza-dipirrometén származékok előállítása és vizsgálata Synthesis and Study of Some Halogenated Aza-dipirromethene Derivatives <i>SZABÓ Yvette, LOVÁSZ Tamás</i>	140
Hulladék polimerek alacsony hőmérsékletű termo-katalitikus hóbontása: a termékek in-situ minőségjavítása Low Temperature Pyrolysis of Waste Polymers: In-situ Quality Improving of the Products <i>ZSINKA Viktória, FEKHAR Bahmed, MISKOLCZI Norbert</i>	141

Biokonjugátumok – összefogás – közös Bioconjugates – Cooperation – Common Good

HUDEECZ Ferenc ^{1,2}

egyetemi tanár, az MTA rendes tagja

¹ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

²MTA - ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

H-1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1A

Tel: +36-1-372-2828, Fax: +36-1-372-2620, email: fhudecz@elte.hu,

<http://peptid.chem.elte.hu/hudecz.html>

ABSTRACT

The lecture will outline new results in the field of preparation and characterization of two or three-party peptide-bioconjugates exhibiting preserved functional properties (e.g. spectral characteristics, binding, biological activity) of all parties involved. Examples will be presented on the use of peptide bioconjugates a) with reporter entity (e.g. biotin) in the diagnosis b) with effector component for targeting of autoimmune diseases (e.g. Rheumatoid arthritis), and c) with antitumour drug in clinical practice (daunomycin), for the comparative analysis of protein expression profile of HL60 human leukemia cells to understand the cellular mechanism.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az előadás két/három komponensű peptid-biokonjugátumok tervezése, szintézise és jellemzése során elért új eredményeket mutatja be. E vegyületekben a kovalens kötéssel összekapcsolt komponensek megőrzik eredeti (pl. spektrális, kötődési, biológiai) tulajdonságaikat. Példák segítségével áttekintést ad a) riporter molekulát (biotint) tartalmazó epitop konjugátumok, b) tumorelleses vegyületet (daunomicint) vagy c) citotoxikus peptidet tartalmazó célbajuttató peptid konjugátumok sajátosságairól és felhasználásáról a mechanizmus-kutatásban, illetve az autoimmun betegségek korai kimutatásában/kezelésében.

Kulcsszavak/keywords: peptides, bioconjugates, drug-targeting, mechanism of action

- [1] Hudecz, F. Magyar Kémiai Folyóirat, 118, 5-16 (2012)
- [2] Hudecz, F. Magyar Kémiai Folyóirat, 118, 87-88 (2012)
- [3] Uray, K., Magyar, A., Bősze, Sz., Schlosser, G., Hudecz, F. Magyar Kémiai Folyóirat 118, 95-98 (2012)
- [4] Mihala, N., Hudecz, F. In Specialist Periodical Reports - Amino Acids, Peptides and Proteins, Farkas, E.; Ryadnov, M. Eds., The Royal Society of Chemistry, London 37, 1-39 (2012)
- [5] Uray, K., Hudecz, F. In Specialist Periodical Reports - Amino Acids, Peptides and Proteins, Farkas, E.; Ryadnov, M. Eds., The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 39, 68-113 (2015)
- [6] Bősze, Sz., Hudecz, F.: In Specialist Periodical Reports - Amino Acids, Peptides and Proteins, Ryadnov, M. Hudecz, F. Eds. The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 40, 146-198 (2016)
- [7] Hudecz, F., Biokonjugátumok – összefogni érdemes. Magyar Kémiai Folyóirat, 123: 126-133 (2017)
- [8] Bánóczi, Z., Hudecz, F.: In: Specialist Periodical Reports - Amino Acids, Peptides and Proteins, Ryadnov, M., Hudecz, F., Eds.,) The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 42, 85-145 (2018)
- [9] Orbán, E., Manea, M., Marquadt, A. et al., Bioconjugate Chemistry 22: 2154-2165 (2011)
- [10] Szabó, R., Sebestyén, M., Kóczán, Gy., Orosz, Á., Mező, G., Hudecz, F. ACS Combinatorial Science, 19: 246-254 (2017)

- [11] Hudecz, F. Magyar Kémiai Folyóirat, 123, 185-195 (2017)
- [12] Uray, K., Mizuno, M., Inazu, T., Goto, K., Hudecz, F. Biopolymers 102, 390-395 (2014)
- [13] Magyar, A.; Brózik, M.; Hudecz, F. Collection Symposium Series 13, 80-84 (2011)
- [14] Szarka, E., Babos, F., Magyar, A., Huber, K., Szittner, Z., Papp, K., Prechl, J., Pozsgay, J., Nagy, Gy., Rojkovich, B., Gáti, T., Kelemen, J., Baka, Zs., Brozik, M., Pazár, B., Poór, Gy., Hudecz, F., Sármay, G. Immunology 141, 181-191 (2014)
- [15] Babos, F.; Szarka, E.; Nagy, Gy.; Majer, Zs.; Sármay, G.; Magyar, A.; Hudecz, F. Bioconjugate Chemistry 2013, 24,817-827.
- [16] Pozsgay, J., Babos, F., Uray, K., Magyar, A., Gyulai, G., Kiss, É., Nagy, Gy., Rojkovich, B., Hudecz, F., Sármay, G. Arthritis Research & Therapy, 18, 15-27 (2016)

Peptidek posztranszlációs módosítása – kémiai úton

Posttranslational Modification of Peptides – in a Chemical Way

Prof. Dr. TÓTH Gábor

Szegedi Tudományegyetem, ÁOK Orvosi Vegytani Intézet,
6720 Szeged, Dugonics tér 13., cím: 6720 Szeged, Dóm tér 8.
Tel.: (62) 545-139, Fax: (62) 545-971,
toth.gabor@med.u-szeged.hu, <http://www.mdche.u-szeged.hu/index.php>

ABSTRACT

The diversity of the oligomers and polymers made from proteinogenic amino acids is enormous alone, but the enzymic posttranslational modifications after the ribosomal protein synthesis increase this at least an order of magnitude. These alterations could change the 3D structures and the biological recognition fundamentally, therefore the functions in the living systems will change. While the syntheses of the small and medium sized peptides – as a consequence of a long standing innovation today is a moreless routine work, until then the chemical synthesis of small proteins and their modified derivatives remained still a challenging task. In this presentation I would like to discuss the possibilities of the chemical preparation of the glycosylated, phosphorylated, lipophilic manner modified or multiple disulfide bridges containing peptides together with the advantage of the native chemical ligation.

ÖSSZEFOGLALÓ

A természetes fehérjealkotó aminosavakból felépülő oligomerek, polimerek diverzitása önmagában is óriási, de a riboszomális fehérjeszintézist követő enzimatis, úgynevezett posztranszlációs módosítások ezt a változatosságot még legalább egy nagyságrenddel megnövelik. Ezek a változások döntő mértékben megváltoztathatják a három dimenziós szerkezetet, a biológiai felismerést végső soron az élő szervezetben betöltött funkciót. Míg a kis vagy közepes méretű peptidek szintézise sok évtizedes fejlesztő munka eredményeként napjainkra többé kevésbé rutin feladattá vált, addig a kis fehérjék továbbá a módosított származékok (esetenként még viszonylag egyszerű peptidek esetében is) kémiai szintézise változatlanul komoly kihívást jelenthet. Előadásomban glikozilált, foszforilált, lipofil módosítást valamint többszörös diszulfidhidat tartalmazó peptidek, fehérjék kémiai szintézisének lehetőségéről, valamint a natív kémiai ligáció nyújtotta előnyökről szeretnék beszámolni.

Mikrohullámú besugárzás és katalízis a szerves foszforvegyületek szintézisében

Microwave Irradiation and Catalysis in Organophosphorus Chemistry

KEGLEVICH György, KISS Nóra Zsuzsa, BÁLINT Erika, HENYECZ Réka,
GRÜN Alajos, MUCSI Zoltán

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,
1111 Budapest, Budafoki út 8; e-mail: gkeglevich@mail.bme.hu

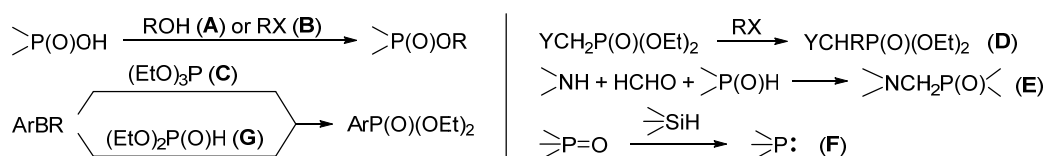
ABSTRACT

The microwave (MW) technique has become an important tool in organophosphorus chemistry [1]. In this paper, the advantages of MWs in different catalytic reactions are surveyed. The first case is, when the MW-assisted direct esterification of phosphinic acids becomes more efficient in the presence of an ionic liquid catalyst (A) [2]. The second instance is, when catalytic reactions, such as the phase transfer catalyzed (PTC) O-alkylation of phosphinic acids (B), or the Arbuzov reaction of aryl bromides (C) are promoted further by MW irradiation. It is also an option that MWs may substitute catalysts, such as in the PTC alkylation of active methylene containing P-derivatives (D) [3], in Kabachnik–Fields condensations (E) [4], and in reluctant P=O deoxygenations (F) [5]. Another valuable finding of ours is that in the Hirao P–C coupling applying Pd(OAc)₂ as the catalyst, the slight excess of the >P(O)H reagent may substitute the usual P-ligands (G) [6].

ÖSSZEFOGLALÓ

A mikrohullámú technika egy fontos eszköz a szerves foszforvegyületek szintézisében [1]. Ebben az előadásban a MW besugárzás előnyeit tekintjük át katalitikus reakciókban. Az első eset az, amikor a foszfinsavak MW-vel segített észteresítése alkoholokkal hatékonyabbá válik ionfolyadék katalizátor jelenlétében (A) [2]. A második lehetőség az, hogy bizonyos katalitikus reakciókat, mint pl. a foszfinsavak fázistranszfer-katalizált (PTC) alkilezését (B), vagy az aril-bromidok Arbuzov-reakcióját (C) MW besugárzással segítik. Az is előfordulhat, hogy a MW katalizátorokat válthat ki. Ezt az aktív metilénsoportot tartalmazó P-származékok PTC alkilezése (D) [3], vagy a Kabachnik–Fields kondenzációk (E) [4] példázhatják. Értékes felfedezésünk továbbá, hogy a Pd(OAc)₂ katalizátor jelenlétében megvalósított Hirao P–C kapcsolási reakcióban a >P(O)H reagens kis feleslege helyettesítheti a szokásos P-ligandumokat (6) [6].

Kulcsszavak: szerves foszforvegyületek, mikrohullám, katalízis, zöldkémia, szintézisek



- [1] G. Keglevich, N. Z. Kiss, A. Grün, E. Bálint, T. Kovács, *Synthesis*, 2017, 49, 3069.
- [2] N. Z. Kiss, G. Keglevich, *Tetrahedron Lett.*, 2016, 57, 971.
- [3] G. Keglevich, E. Bálint, A. Grün, *Catalysts*, 2015, 5, 634.
- [4] G. Keglevich, E. Bálint, *Molecules*, 2012, 17, 12821.
- [5] T. Kovács, G. Keglevich, *Curr. Org. Chem.*, 2017, 21, 569.
- [6] G. Keglevich, R. Henyecz, Z. Mucsi, N. Z. Kiss, *Adv. Synth. Catal.*, 2017, 359, 4322.

Mi van egy molekulában: atommagok és elektronok egymásközt; A Szomolyai függvény módszere a kémiai kötések értelmezésére

What is in a Molecule: Interacting Nuclei and Electrons; The Somoyai Function Approach to the Analysis of Chemical Bonding

MEZEY Pál ^{1,2,3}

¹ Department of Chemistry, Memorial University of Newfoundland, St. John's NL Canada,

² Institute of Chemistry, Eotvos University of Budapest, Hungary

³ Guest Professor at the Babes-Bolyai University, Cluj, Romania, paul.mezey@gmail.com

ABSTRACT

What is in a molecule: atomic nuclei and electrons, nothing else, and their interrelations determine all molecular properties. As descriptive tools in molecular modelling, spherical atomic contributions imagined inside molecules are very popular even today, yet they are misleading, since chemistry, indeed, comes from the very deviation from spherical, atomic models within molecules. The Somoyai function is a weighted difference of the electronic density function and the composite nuclear potential (where the latter is also called the “bare nuclear potential” by Parr and Berk [1,2]), providing effective tools for the 3D shape representation of the bonding patterns of molecules. In the Somoyai function approach [3], the actual bonding, that is, the *deviations* of the molecular electron density from the simple “Atoms in Molecules” models and other, superimposed sphere models is emphasized, recognizing the fact, superimposed spherical “Atoms in Molecules” models cannot ever represent such fundamental properties of molecular electron densities as pi bonds and aromatic ring systems. In this presentation some of the newer developments of the Somoyai function approach are discussed.

ÖSSZEFOGLALÓ

Mi van egy molekulában: atommagok és elektronok, semmi más, és ezek egymásközi viszonya határoz meg minden molekuláris tulajdonságot. Gömbszerű, atomi leírások molekulákon belül elképzelve ma is igen népszerűek a modellezésben, de félrevezetőek, hiszen éppen a lokálisan gömbi, atomszerű modellektől való eltérés adja a kémiát. A Szomolyai függvény a molekuláris elektronsűrűség és a kombinált magpotenciálok függvényének súlyozott különbsége (ahol az utóbbira Parr és Berk “csupasz magpotenciál”-ként is hivatkozott [1,2]), és ez a függvény hatékony eszközként szolgálhat a molekuláris kötésmódok három-dimenziós alakjainak leírásához. A Szomolyai függvény [3] alkalmazásakor a tényleges kémiai kötések, tehát a lokálisan gömbszerű atomi leírásoktól való eltérésen, és az egyszerű, “Atomok a Molekulákban” és más, egymásra halmozott gömbi modellekhez képest a létrejött változásokon van a hangsúly, arra a felismerésre is alapozva, hogy az egymásra halmozott gömbökből származó modellek nem képesek leírni az olyan alapvető tulajdonságait a molekuláris elektronsűrűségeknek, mint a pi kötés, vagy az aromás gyűrűk. Ebben az előadásban a Szomolyai függvény néhány újabb alkalmazásáról lesz szó.

[1] R.G. Parr, S.R. Gadre, and L.J. Bartolotti, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 76, 2522 (1979).

[2] R.G. Parr and A. Berk, The bare-nuclear potential as harbinger for the electron density in a molecule, in: “Chemical Applications of Atomic and Molecular Electrostatic Potentials”, Eds. P. Politzer and D.G. Truhlar, Plenum Press, New York 1981, pp51-62.

[3] P.G. Mezey, Descriptors of Molecular Shape in 3D, in "From Chemical Topology to Three-Dimensional Geometry", Ed. A.T. Balaban, Plenum Press, New York, 1997, pp 25-42.

A szintézis idő módosításának hatása BiOX (X = Cl, Br, I) anyagok morfológiájára és fotokatalitikus aktivitására

The Effect of the Synthesis Duration on the Morphology and Photocatalytic Activity of BiOX (X = Cl, Br, I) Materials

Enikő BÁRDOS^{1,4}, Anna Krisztina KIRÁLY¹, Zsolt PAP^{2,3}, Lucian BAIA^{2,4},
Seema GARG⁵, ÁBRAHÁM Imre⁶, Klára HERNÁDI¹

¹ Department of Applied and Environmental Chemistry, University of Szeged,
Rerrich Béla tér 1, HU-6720, Szeged, Hungary

² Nanostructured Materials and Bio-Nano-Interfaces Center, Institute for Interdisciplinary Research
on Bio-Nano-Sciences, Babeş-Bolyai University,
Treboniu Laurian 42, RO-400271 Cluj-Napoca, Romania

³ Institute of Environmental Science and Technology, University of Szeged,
Tisza Lajos krt. 103, Szeged HU-6720, Hungary

⁴ Faculty of Physics, Babeş-Bolyai University, M. Kogălniceanu 1,
RO-400084 Cluj-Napoca, Romania

⁵ Amity University, Department of Chemistry,
Sector-125, Noida, Uttar Pradesh, India

⁶ UniChem Kft., Kistelek tanya 491, HU-6760

ABSTRACT

The bismuth-oxyhalides (BiOX, X=Cl, Br, I) semiconductor materials shows great promise in the photocatalytic degradation of organic pollutants, both in UV and visible light. The aim of current research was to investigate the synthesis duration and to prepare visible light active bismuth-oxyhalides using solvothermal crystallization. We have investigated the influence of the synthesis duration and the reaction time on structural (crystal size, crystal phases etc.), morphological (crystal shape), optical (band gap values) and photocatalytic properties. Methyl-orange and Rhodamin-B was used as model pollutant in photocatalytic degradation process and the change of concentration was followed with UV-Vis spectroscopy.

Keywords: hydrothermal crystallization, bismuth oxyhalides, methyl orange, Rhodamin-B

ÖSSZEFOGLALÓ

A bizmut-oxohalogenid (BiOX, X=Cl, Br, I) félvezetők fotokatalitikus aktivitása kitűnő mind látható és UV fény tartományban, ezért heterogén fotokatalízis területén alkalmazzák, mint fotokatalizátor. Kutatómunkánk célja az volt, hogy megvizsgáljuk hidrotermális kristályosítás körülményeit és látható fényre aktív fotokatalizátort készítsünk. Megvizsgáltuk a szintézis során alkalmazott szintézis idők változtatásának hatását az előállított anyagok szerkezetére (részecskeméret, kristályosság), morfológiájára (kristály alak) optikai tulajdonságára (tiltottsáv-szélesség) és fotokatalitikus aktivitására. Modellszennyezőnek a metilnarancs és Rhodamin-B színezéket választottunk, melynek fotokatalitikus bontását UV-Vis spektrofotométerrel követtük nyomon.

Kulcsszavak: hidrotermális kristályosítás, bizmut-oxohalogenidek, metilnarancs, Rhodamin-B

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönetüket szeretnék kifejezni az anyagi támogatásért Magyar-Indiai TÉT pályázatnak (TÉT_15_IN-1-2016-0013). B.E. köszönetét fejezi ki az Erasmus+ és a Makovecz ösztöndíj programoknak.

Átmenetifémek szalén/szalán komplexeinek előállítása és alkalmazása Suzuki-Miyaura kapcsolatban

Transition Metal Complexes of Tetrahydrosalen Ligands and their Catalytic Properties in C-C cross-coupling Reactions

BUNDA Szilvia¹, Dr. UDVARDY Antal¹, Dr. VORONOVA Krisztina²,
Dr. KOVÁTS Éva³, Dr. KATHÓ Ágnes¹, Prof. Dr. JOÓ Ferenc¹

¹Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
tel.: (36)-52-512900, e-mail: bunda.szilvia@science.unideb.hu, web: fizkem.unideb.hu

²Department of Chemistry, University of Nevada, Reno, NV 89557-0216, USA

³MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet,
1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.

ABSTRACT

Several water-soluble M(II)-salen type complexes, M(II) = Pd(II), Ni(II), Cu(II), were synthesized and applied in Suzuki-Miyaura C-C cross couplings. The highest TOF (40000 h⁻¹) was achieved with Na₂[Pd(dPhHSS)] as catalyst in reaction of iodobenzene and phenylboronic acid. Scope of the catalytic application of the new complexes was studied in reactions of several boronic acid derivatives with a number of aryl halides and dihalides. Water-solubility of the catalysts allowed the use of water as solvent with no organic co-solvents. This process was successfully applied for synthesis water-insoluble biaryls which were isolated in analytical purity (ICP-OES) by simple filtration which resulted in greening of the C-C coupling methodology.

ÖSSZEFOGLALÓ

A klasszikus C-C kötést létrehozó módszerek mellett már az átmenetifémek által katalizált kereszt-kapcsolási reakciók is a szintetikus szerves kémia meghatározó átalakításai közé tartoznak. Ezekben a reakciókban a vizes közeg alkalmazása egyre elterjedtebbé válik. Azonban még napjainkban is tudományos kihívást jelent a szerves oldószerek teljes mellőzése^[1]. Ezért munkánk során célul tűztük ki különböző vízdoldható átmenetifém komplex előállítását és alkalmazását tisztán vizes közegű Suzuki-reakcióban, valamint olyan módszer fejlesztését, mellyel a C-C kapcsolt származékok előállítását és tisztítását szerves oldószer alkalmazása nélkül egyszerű szűréssel is elvégezhetjük.

Kulcsszavak: homogén katalízis, hidrogénezett szalén, Suzuki-Miyaura, C-C kapcsolat, víz

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2.-15-2016-00008 és a GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társ-finanszírozásával valósult meg.

[1] K. Voronova, H. Levente, A. Udvardy, A. C. Bényei, F. Joó: *ChemSusChem*, **2014**, 7, 2230–2239.

Indolo-karbazol származékok szintézise és jellemzése

Synthesis and Characterization of Indolo-carbazole Derivatives

DORNER Norbert-Zsolt¹, Dr. GÁL Emese¹,
Prof. SILAGHI-DUMITRESCU Luminița¹, Prof. Muriel HISSLER²

¹Babeş-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering,
Cluj-Napoca, Arany János Street, No. 11.

²Université de Rennes 1, Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR)
UMR CNRS 6226, 261. Avenue Général Leclerc, 35042 Rennes

ABSTRACT

Organic π -conjugated compounds, based on a ring-fused molecular architecture have received much attention in the last two decades because of their potential application in different electronic devices^[1].

Nitrogen containing heteroaromatic compounds have attracted high research interest in recent years owing to their potential applications for electronic devices, such as *OLEDs*^[2], *OFETs*^[3]. Among these heterocyclic compounds, indolo-[3,2-*b*]carbazole (ICZ) frameworks are interesting building blocks for the development of functional π -conjugated systems since ICZ are planar and electron rich systems behaving as an electron-donor^[4]. Furthermore, this structure can be easily chemically modified (bromination, formylation, acylation). These favorable properties prompt us to synthesize and to study different A-D-A (acceptor-donor-acceptor) systems. We demonstrated that these systems present high thermal stabilities and suitable optical and redox properties for the development of electronic devices.

Keywords: indole, indolo[3,2-*b*]carbazole, optoelectronic devices

ÖSSZEFOGLALÓ

A kondenzált, kiterjedt π -konjugációval rendelkező vegyületek kiemelkedő figyelmet kaptak az elmúlt két évtizedben, mivel ezek potenciálisan alkalmazhatóak különböző elektronikai berendezés építésében^[1].

A nitrogén tartalmú heteroaromás vegyületek nagy érdeklődést keltettek az *OLED*^[2], *OFET*^[3] technológiákban történő potenciális alkalmazhatóságuknak köszönhetően. Az ilyen típusú vegyületek közül az indolo-[3,2-*b*]karbazol (ICZ) vázak fontos építőkövek a funkcionizált π -konjugált rendszerek előállításában, mivel az ICZ planáris, elektronban gazdag, donor tulajdonsággal rendelkező vegyületek. Mindemellett ezek a vázak egyszerűen funkcionizálhatóak (brómozás, formilezés, acilezés). Ezek a kedvező tulajdonságok arra sarkaltak minket, hogy előállítsunk és tanulmányozzunk különböző A-D-A (akceptor-donor-akceptor) rendszereket. Bebizonyítottuk, hogy ezek a vegyületek magas termális stabilitással és megfelelő optikai, elektrokémiai tulajdonságokkal rendelkeznek ahhoz, hogy elektronikai berendezésekben alkalmazhatóak lehessenek.

Kulcsszavak: indol, indolo[3,2-*b*]karbazol, optoelektronikai eszközök

IRODALOM/ REFERENCES:

- [1] R. A Irgashev, N. A. Kazin, G. L. Rusinov, V. N. Charushin, *Beilstein J Org Chem.* **2017**; 13 1396–1406.
- [2] H. Shi; J. Yuan; X. Wu; X. Dong; L. Fang; Y. Miao; Hua Wang; Fangqin Cheng; *New J. Chem.*, **2014**, 38, 2368-2378
- [3] X. Qian; L. Shao; H. Li; R. Yan; X. Wang; L. Hou; *Journal of Power Sources*, **2016**, 319, 39-47.
- [4] S. Streckaite; R. Karpicz; A. Gruodis; W. Dehaen; S. Van Snick; M. Kirkus; S. Grigalevicius; J. V. Grazulevicius; V. Gulbinas; *Dyes and Pigments*, **2016**, 133, 120-126

Réz-alapú félvezetők előállítási paramétereinek szabályozása

Controlled Synthesis of the Copper-based Photocatalysts

FODOR Szilvia^{1,2,*}, PAP Zsolt^{2,3}, BAIÁ Lucian^{2,4}, HERNÁDI Klára¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete,
Treboniu Laurian 42, Kolozsvár, RO-400271

³ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Környezettudományi és Műszaki Intézet, Tisza Lajos körút 103, Szeged, HU-6720

⁴ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,
Mihai Kogălniceanu 1, Kolozsvár, RO-400084
*fod_szilvia@chem.u-szeged.hu

ABSTRACT

The current issue in the photocatalysis is to exploit the visible light range of sunlight with higher efficiency. According to current state of this research topic, applying copper-based semiconductors it is possible the photodegradation of model/organic compounds using visible lights. The semiconductor morphology and size distribution play an important role in the degradation of pollutants. The aim of present study is to develop this problem. During the experimental section the effect of the stabilizer agent (ethylenediaminetetraacetic acid, polyvinylpyrrolidone), system temperature dependence (60 °C, 70 °C, 80 °C) and the role of the starting material were studied.

Keywords: photocatalysis, copper-oxide, synthesis parameters, optimization

ÖSSZEFOGLALÓ

A fotokatalízis aktuális kihívása a napfény látható fény tartományának a nagyobb hatásfokkal történő hasznosítása. A kutatások jelenlegi állása szerint réz-alapú félvezetők alkalmazásával lehetőség nyílik szerves szennyezők lebontására, látható fénnel történő megvilágítás mellett, fotokatalitikus úton. A szennyezők lebontásában fontos szerepet játszik a félvezető morfológiája és méreteloszlása. Jelen munka célja ennek a problémának a kidolgozása és széles körű vizsgálata. Az előállítási szakaszban vizsgáltuk a stabilizálószer hatását (etilén-diamin-tetraecetsav, polivinil-pirrolidon), a rendszer hőmérséklet függését (60 °C, 70 °C, 80 °C), valamint a kiinduló anyag szerepét.

Kulcsszavak: fotokatalízis, réz-oxid, előállítási paraméterek, optimalizálás

Enantiomer tiszta aminok előállítása Cv- ω -transzaminázzal

Enantiopure Amine Synthesis with Cv- ω -transaminase

GAL Cristian Andrei, Dr. VARGA Andrea, Dr. BENCZE László Csaba,
Dr. TOŞA Monica Ioana, Dr. PAIZS Csaba

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Kolozsvár, Arany János u. 11 sz., 400028, Kolozsvár, Románia,
k.gal@hotmail.com, paizs@chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

Chiral amines are important building blocks for the synthesis of pharmaceutical products, fine chemicals and agrochemicals.ⁱ The ω -transaminases (ω -TAs) are the only natural enzymes that can directly synthesize enantiopure chiral amines by asymmetric amination of prochiral ketones.ⁱⁱ Despite the enormous potential of ω -TAs, fundamental challenges associated with, severe by-product inhibition and with displacing unfavorable equilibrium positions towards product formation have prevented the widespread application of these biocatalysts.ⁱⁱⁱ In this work we present the kinetic resolution pathway towards enantiopure amine synthesis, with kinetic parameters measured. Our further objective is developing a multienzymatic cascade for enantiotop selective amination of 1-(hetero)aryl-ethanones.

ÖSSZEFOGLALÓ

A királis aminok a finom vegyi anyagok, gyógyszerek és a mezőgazdasági vegyszerek fontos építőelemei.¹ Az ω -transzaminázok (ω -TA) az egyetlen olyan enzimek amelyek képesek prokirális ketonokból, értékes enantiomer tiszta aminokat előállítani, aszimmetrikus szintézis révén.² A bennük rejlő hatalmas potenciál ellenére nem elterjedtek, mivel számos probléma jelentkezik, a kotermék inhibíció illetve a nem kedvező egyensúlyi paraméterek miatt.³ Ebben a munkában a kinetikus rezolválás révén előállított enantiomertiszta aminokat illetve ezen reakciók kinetikai paramétereit mutatjuk be. További céljaink közé tartozik multienzimrendszer fejlesztése az enantiotóp szelektív aminálások tanulmányozása.

- i Breuer M, Ditrich K, Habicher T, Hauer B, Kessler M, Stürmer R, Zelinsky T, Angew. Chem. Int. Ed. 2004, 43, 788-824
- ii Abrahamson MJ, Vazquez-Figueroa E, Woodall N, Moore JC, Bommarius AS., Angew Chem Int Ed 2012, 51, 3969-3972; (b) Abrahamson MJ, Wong JW, Bommarius AS., Adv Synth Catal 2013, 355, 1780-1786
- iii Truppo MD, Rozzell JD, Moore JC, Turner NJ., Org. Biomol. Chem. 2009, 7, 395-398; b) D. Koszelewski, I. Lavandera, D. Clay, G. M. Guebitz, D. Rozzell, W. Kroutil, Angew. Chem. Int. Ed. 2008, 47, 9337-9340

Jód-benzol származékok aminokarbonilezése amino-tiazolokkal és amino-tiadiazolokkal mint nukleofilekkel

Aminothiazoles and Aminothiadiazoles as Nucleophiles in Aminocarbonylation of Iodobenzene Derivatives

GERGELY Máté¹, KOLLÁR László^{1,2}

¹Pécsi Tudományegyetem

Szervetlen Kémiai Tanszék és Szentágotthai Kutatóközpont,

7624 Pécs, Ifjúság útja 6.

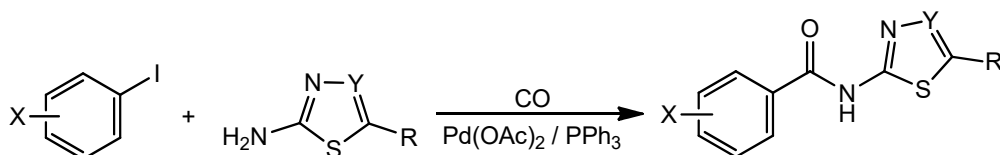
²MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport, 7624 Pécs, Ifjúság útja 6.

ABSTRACT

Among heterocycles, thiazoles and especially 1,3,4-thiadiazoles represent families of biological importance. Aminocarbonylation of aryl iodides with 2-amino-1,3-thiazole and 2-amino-1,3,4-thiadiazoles as *N*-nucleophiles was carried out in the presence of palladium catalysts. All of the applied substrates have shown high chemoselectivity toward carboxamides, *i.e.*, practically no double carbon monoxide insertion resulting in 2-ketocarboxamides took place.

ÖSSZEFOGLALÓ

A heterociklusosok között a tiazolok és különösen az 1,3,4-tiadiazolok nagy biológiai jelentőséggel rendelkező vegyület-családok. Munkánk során aril-jodidok palládium-katalizált aminokarbonilezését vizsgáltuk 2-amino-1,3-tiazol és 2-amino-1,3,4-tiadiazolok mint *N*-nukleofilok jelenlétében. Minden esetben nagy szelektivitást tapasztaltunk a karbonsavamidok irányában, vagyis gyakorlatilag nem történt kettős szén-monoxid beékelődés, amelynek során a 2-keto-karbonsavamidok keletkeznek.



X = H, *t*Bu, CH₃, OCH₃, Ph, F, Cl, Br, COOH, COOCH₃, C(O)CH₃, CF₃, CN

Y: N; **R**: H, *t*Bu, CF₃

Y: CH; **R**: H

Kulcsszavak: Palládium, tiadiazol, tiazol, karbonilezés, szén-monoxid, karbonsavamid

Szénegömb segítségével szintetizált nagy fotokatalitikus aktivitású titán-dioxid üreges szerkezetek előállítása

Preparation of Carbon Sphere-based Titanium Dioxide Hollow Structures with High Photocatalytic Activity

GYULAVÁRI Tamás^{1,2*}, Dr. VERÉB Gábor^{2,3}, Dr. PAP Zsolt^{2,4}, Dr. HERNÁDI Klára^{1,2}

¹ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

² Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet, Környezatkémiai Kutatócsoport, Tisza Lajos körút 103, Szeged, HU-6720

³ Szegedi Tudományegyetem, Mérnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézet, Moszkvai krt. 9, Szeged, HU-6725

⁴ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Nanostrukturált Anyagok és Bio-Nano Felületek Központja, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Kutatóintézete, Treboniu Laurian 42, Kolozsvár, RO-400271
E-mail: *gyulavarit@chem.u-szeged.hu

ABSTRACT

In the present study, carbon sphere templates were synthesized by the hydrothermal treatment of ordinary table sugar (sucrose). The obtained carbon spheres were characterized by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM) and infrared spectroscopy (IR). By the utilization of carbon spheres, titanium dioxide-carbon sphere (TiO₂-CS) composites and TiO₂ hollow structures (HS) were synthesized by coating CSs with self-made TiO₂ and removing CSs with calcination, respectively. The effects of applied synthesis parameters (quantity of precursor, CS purification method, applied furnace) on the coating process was investigated in detail. The as obtained photocatalysts were characterized by XRD, SEM, BET, diffuse reflectance spectroscopy (DRS), IR and X-Ray photoelectron spectroscopy (XPS) measurements, and the photocatalytic activity was determined by the degradation of phenol as model contaminant under visible light irradiation.

Keywords: titanium dioxide, carbon sphere, hollow structure, phenol, visible light

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen tanulmányban közönséges asztali cukorból (szukrózból) készült oldat hidrotermális kezelésével állítottunk elő szénegömb templátokat. A szénegömböket XRD, SEM és IR mérésekkel vizsgáltuk. A szénegömbök felhasználásával TiO₂-szénegömb kompozitokat és TiO₂ üreges szerkezeteket állítottunk elő a templátok saját készítésű titán-dioxiddal történő bevonásával, illetve a templát kalcinálással történő eltávolítása révén. Vizsgáltuk az alkalmazott szintézisparaméterek (prekursor mennyiség, szénegömbtisztítási eljárás, alkalmazott kemence) hatását a bevonatképzés folyamatára. Az előállított fotokatalizátorok anyagszerkezeti jellemzőit XRD, SEM, BET, DRS, IR és XPS mérésekkel, fotokatalitikus aktivitásukat pedig fenol modellszennyezővel vizsgáltuk látható fénnel történő gerjesztés esetén.

Kulcsszavak: titán-dioxid, szénegömb, üreges szerkezet, fenol, látható fény

Köszönetnyilvánítás: A kutatást az NFKI-K-124212 projekt támogatta. Gyulavári Tamás köszönetét fejezi ki a GINOP-2.3.2-15-2016-00013 azonosító számú projektnek. Veréb Gábor köszönetét fejezi ki, hogy a munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (Magyar Tudományos Akadémia) és az Új Nemzeti Kiválóság Program (Emberi erőforrások Minisztériuma; pályázati azonosító: ÚNKP-18-4-SZTE-78) támogatásával készülhetett.

Lantanoidákkal dópolt NaYF₄-TiO₂-Au kompozitok előállítása és fotokatalitikus vizsgálata

Preparation of Lanthanide Doped NaYF₄-TiO₂-Au Composites and their Photocatalytic Activity

HAMPEL Boglárka^{1,3,*}, PAP Zsolt^{1,3,4}, HERNÁDI Klára¹,
Lucian BAIA^{3,4}

¹ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

² Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar, Környezettudományi és
Műszaki Intézet, Környezetkémiai Kutatócsoport, Tisza Lajos körút 103, Szeged, HU-6720

³ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár,
Treboniu Laurian utca 42, Cluj-Napoca, RO-400271

⁴ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár,
Mihai Kogălniceanu utca 1, Cluj-Napoca, RO-400084

*hampelboglarka@chem.u-szeged.hu

ABSTRACT

In the present study composite photocatalysts were prepared and tested. These composite systems are made of NaYF₄ (NYF) doped with lanthanide cations (Yb³⁺, Er³⁺, Nd³⁺, Tm³⁺), TiO₂ (Evonik Aeroxide P25 and Aldrich Anatase) and gold nanoparticles. The composites were constructed as follows: 33% NYF, 66% TiO₂-Au, while the gold content was also changed during production. XRD, SEM, TEM and DRS measurements were performed to analyze the structural and optical properties. The photocatalytic activity of the composites was also tested using methyloange solution as a model pollutant. Three different light sources were used: UV-, visible- and NIR light. The concentration of samples taken during the tests were monitored in time by UV-VIS spectroscopy.

Keywords: NaYF₄-TiO₂-Au composites, methyl orange, photocatalysis

ÖSSZEFOGLALÓ

A jelen kutatásban kompozit fotokatalizátorokat állítottunk elő és teszteltünk. Ezek a rendszerek lantanoida ionokkal (Yb³⁺, Er³⁺, Nd³⁺, Tm³⁺) dópolt NaYF₄, TiO₂ és arany nanorészecskékből álltak. A kompozitokat a következőképpen állítottuk elő: 33% NYF, 66% TiO₂-Au, míg az aranytartalom az előállítás során. A szerkezeti és optikai tulajdonságok felderítése érdekében XRD, SEM, TEM és DRS méréseket végeztünk. A fotokatalitikus aktivitás vizsgálatát is elvégeztük, melyhez metilnarancs oldatot használtunk modellszennyezőként. Három különböző fényforrást alkalmaztunk: UV-, látható- és közeli infravörös fényt. A kísérletek során vett minták koncentrációját spektrofotométerrel követtük.

Kulcsszavak: NaYF₄-TiO₂-Au kompozitok, metilnarancs, fotokatalízis

1,2,3-triazolil linkert tartalmazó cinkona-kalkon hibridek szintézise és daganatellenes hatása

Synthesis and Anti-cancer Activity of Cinchona-chalcone Hybrids with 1,2,3-triazolyl linkers

JERNEI Tamás¹, DURÓ Cintia¹, DEMBO Antonio¹, TAKÁCS Angéla², LAJKÓ Eszter, PhD², LÁNG Orsolya, PhD², KŐHIDAI László, CSc², OLÁHNÉ SZABÓ Rita, PhD³, BŐSZE Szilvia, PhD³, MEZŐ Gábor, DSc³, CSÁMPAI Antal, DSc¹

¹Kémia Intézet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

²Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézet, Semmelweis Egyetem, Budapest

³MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport, Budapest

ABSTRACT

Chalcones fall under the family of Michael-acceptor type therapeutic agents with diverse effects on biological systems, they are considered as an important building block of the research of anti-cancer agents through their various mechanisms of effect¹. During a recent project of our research group we have synthesised reference chalcones, which antiproliferative activity could be enhanced by conjugation to cinchona alkaloids². As an expansion of this work we have prepared further 23 cinchona-chalcone hybrids, which were investigated on multiple human cancer cell lines to determine their antiproliferative activity.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kalkonok a Michael-akceptor típusú hatóanyagok családjába tartozó, változatos hatással rendelkező vegyületek, amelyek számos lehetséges hatásmechanizmusuk révén a daganatellenes hatóanyagkutatás alapköveinek számítnak¹. Kutatócsoportunk korábbi munkája során a referenciaként előállított kalkonok antiproliferatív hatását cinkona alkaloidokhoz való konjugáció révén jelentősen sikerült erősíteni², amely kutatás kiterjesztéseként előállítottunk további 23 cinkona-kalkon hibridet, amelyek antiproliferatív hatását több humán, daganatos sejtvonalon vizsgáltuk.

Kulcsszavak: cinkona alkaloidok, kalkonok, CuAAC, RuAAC, daganatellenes hatás

REFERENCIÁK.:

- [1] Kocsis, L., Szabó, I., Bősze, S., Jernei, T., Hudecz, F., Csámpai, A., **2016**, *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 26, 3, 946-949.
- [2] Mahapatra, D. K., Bharti, S. K., Asati, V., **2015**, *Eur. J. Med. Chem.*, 98, 69-114.

***Grignard*-reagensek kalkonszármazékokra történő heterogén katalitikus 1,4-addíciója**

Heterogenous Catalytic 1,4-addition of *Grignard*-reagents to Chalcones

JUHÁSZ Kinga¹, HELL Zoltán¹

¹ Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest Budafoki út 6-8., +3614631414, juhasz.kinga@mail.bme.hu

ABSTRACT

The addition of nucleophiles to electron-deficient conjugated systems is a widely used method for the formation of carbon-carbon bonds in synthetic organic chemistry. In our research group we examined the chemoselective 1,4-addition reaction of *Grignard* compounds to chalcones in the presence of copper(II) on a 4Å molecular sieve support. An important advantage of the catalyst used is the reusability without significant loss of the activity.

ÖSSZEFOGLALÓ

A szintetikus szerves kémiában a szén-szén kötés kialakításának egyik széleskörűen alkalmazott módja nukleofilek addíciója elektronban szegény konjugált rendszerekre. Kutatócsoportunkban *Grignard*-reagensek kalkonszármazékokra történő kemoszelektív 1,4-addícióját vizsgáltuk 4Å molekulaszita hordozós réz(II) katalizátor jelenlétében. Az alkalmazott katalizátor egyik nagy előnye, hogy a reakció után jelentős aktivitáscsökkenés nélkül újrafelhasználható.

Kulcsszavak: Grignard reakció, kalkon, 1,4-addíció, heterogén katalízis, réz

Kationos színezékek adszorpciója ortorombos α - MoO_3 -on

Adsorption of Cationic Dyes on Orthorhombic α - MoO_3

KEDVES Endre-Zsolt^{1,2}, RAVASZ Alpár³, PAP Zsolt^{2,4}, HERNÁDI Klára⁵, Lucian BAIA^{1,2}

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,
Mihail Kogălniceanu utca 1,
Kolozsvár, RO-400084

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete,
Treboniu Laurian utca 42, Kolozsvár, RO-400271

³ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Arany János utca 11, Kolozsvár, RO-400028

⁴ Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék,
Tisza Lajos krt. 103, Szeged, HU-6720

⁵ Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet,
Tisza Lajos krt. 103, Szeged, HU-6720
kedves.endre91@gmail.com

ABSTRACT

The α - MoO_3 nanocrystals are often used in advanced oxidation processes, as photocatalyst and in composites as charge separator. In this study we investigated the preceding process of photocatalysis, the adsorption, with cationic dyes (methylene blue, rhodamine B, malachite green, crystal violet). We investigated the adsorption capacity and kinetics in function of the adsorbate structure and adsorbent characteristics. MoO_3 crystals were characterized structural and morphological with different characterization techniques such as: XRD, SEM, BET and IR. The dye concentration was followed by UV-vis spectroscopy and we studied the bonding between the adsorbate and the α - MoO_3 crystals surfaces with IR spectroscopy.

Keywords: orthorhombic, MoO_3 , adsorbent, cationic dyes, adsorption capacity

ÖSSZEFOGLALÓ

Az α - MoO_3 nanokristályok nagyhatékonyságú oxidációs eljárásokban gyakran alkalmazottak, mint fotokatalizátorok illetve kompozitokban töltésszeparátorként. Kutatásaink során a fotokatalízist megelőző folyamatot, az adszorpciót, tanulmányoztuk szerves kationos színezékekkel (metilénkék, rodamin B, malachit zöld, kristály lila). Az adszorptívumok és az adszorbens szerkezete szerint vizsgáltuk az adszorpciós kapacitást és kinetikát. A MoO_3 kristályokat szerkezetileg és morfológiaiilag jellemeztük különböző mérés technikákkal (XRD, SEM, BET, IR). A szerves anyagok koncentrációját UV-vis spektroszkópiával követtük illetve IR spektroszkópiával jellemeztük az adszorptívum kötődését az adszorbens felületéhez.

Kulcsszavak: ortorombos, MoO_3 , adszorbens, kationos színezékek, adszorpciós kapacitás

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönik az anyagi támogatást a PN-III-P1-1.1-TE-2016-1588 jelű pályázatnak.

A Dinárokban kialakult Föhn hatása a Krassó-Szörény megyében begyűjtött esővíz ionkompozíciójára

The Dinaric Alps Foehn effect on the Ionic Composition of Rainwater Collected in Caras-Severin County, Romania

Drd. KERESZTESI Ágnes^{1,2}, Dr. SZÉP Róbert^{1,2}, Drd. BOGA Réka^{1,2},
Dr. BODOR Zsolt², Dr. TONK Szende³, Drd. Ion-Andrei NITA^{4,5}

¹University of Pécs, Faculty of Sciences, Doctoral School of Chemistry,
Ifjúság 6, 7624, Pécs, Hungary

²Sapientia Hungarian University of Transylvania, Faculty of Economics,
Socio - Human Science and Engineering, Department of Bioengineering,
Piața Libertății, nr. 1, ZIP 530104, Miercurea Ciuc, Romania

³Sapientia Hungarian University of Transylvania, Faculty of Sciences and Arts,
Calea Turzii, nr. 4, ZIP 400193, Cluj Napoca, Romania

⁴Alexandru Ioan Cuza University, Bulevardul Carol I, nr. 11, ZIP 700506, Iași, Romania

⁵National Meteorology Administration, Soseaua București-Ploiești, nr. 97, District 1,
ZIP 013686, Bucharest, Romania

ABSTRACT

The aim of this study is the assessment of the rainwater composition and the various sources of major ions during the 2014-2017 period at three different sampling sites in Caras-Severin County, taking into account the characteristic atmospheric circulations, the main air mass transport routes and the Foehn effect on the precipitation chemistry. Rainwater samples were analyzed for pH, electrical conductivity, major anions and cations. The pH values of individual precipitation events varied from 4.33 to 8.43 for the entire studied region, with an average of 6.70. At all sampling sites the most abundant anions were SO_4^{2-} and Cl^- , while the dominant cations were represented by Ca^{2+} and Mg^{2+} .

ÖSSZEFOGLALÓ

A tanulmány célja három különböző területen begyűjtött esővíz minták vizsgálata ionkompozíció és forráselemzés szempontjából 2014 és 2017 között Krassó-Szörény megyében, figyelembe véve a jellemző légköri keringéseket, a légtömeg áramlásokat és a Föhn hatását a csapadékkémia. Az esővíz mintákat pH, fő anionok és kationok esetében elemeztük. Az pH értékek a vizsgált régióban 4,33 és 8,43 között változtak, a csapadék átlag pH értéke 6,70 volt. A legnagyobb koncentrációban az anionokat illetően a SO_4^{2-} és Cl^- volt jelen, míg a domináns kationokat a Ca^{2+} és a Mg^{2+} képviselte.

Kulcsszavak: Föhn hatás, csapadékkémia, forrás analízis, légköri áramlások, tengeri sók hiánya

Domino gyűrűzárási reakciók O,N-heterociklusok előállítására

Domino Cyclization Reactions for the Preparation of O,N-Heterocycles

KIRÁLY Sándor Balázs, KAJTÁR Mihály, KOVÁCS Tibor, Dr. MÁNDI Attila,
Prof. Dr. ANTUS Sándor, Prof. Dr. KURTÁN Tibor

Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1,
tel: +36 52 512 900 / 22466 ; 22476

kiraly.sandor.balazs@science.unideb.hu, kurtan.tibor@science.unideb.hu

ABSTRACT

Aryl aldehydes containing a dihydro-(2H)-pyrane moiety were reacted with C-H active compounds in a Knoevenagel condensation, and the resultant α,β -unsaturated ketone moiety underwent a diastereoselective hetero Diels-Alder reaction, [1,5]-hydride shift and cyclization, [2+2] cycloaddition or [4+2] cycloaddition-SEAr reaction sequence, affording different O,N-heterocycles with new scaffolds. Some of which showed antiproliferative effect on human cancer cell lines with IC_{50} down to 0.1 μ M.

ÖSSZEFOGLALÓ

Dihidro-(2H)-pirán egységet tartalmazó aril-aldehid származékok és C-H aktív vegyületek Knoevenagel kondenzációs reakciójában a keletkező α,β -telítetlen keton rész diasztereoselektív hetero Diels-Alder reakcióban, [1,5]-hidridvándorlás-gyűrűzáras, [2+2] cikloaddíció, vagy [4+2] cikloaddíció-SEAr reakció szekvenciában vett részt, különböző, új gyűrűrendszert tartalmazó O,N-heterociklusokat eredményezve. Ezek közül néhány sejtosztódásgátló hatást mutatott humán rákos sejtvonalakon, szub- μ M-os IC_{50} értékkel.

Kulcsszavak: domino reaction, O,N-heterocycles, diastereoselective, antiproliferative activity, structure elucidation.

Fejlesztési lehetőségek ipari szennyvízkezelésre a BorsodChem Zrt. TDI üzemében a nitrát anion koncentrációjának csökkentése céljából

Development Option for Industrial Waste Water Treatment at BorsodChem Ltd. TDI plant in Order to Decrease the Nitrate anion Concentration

KORBÁCS Ákos^{1,2}, SZABÓ Éva¹, MARKÓ Árpád¹, FODOR Károly¹, FARKAS László¹

¹BorsodChem Zrt., Bolyai tér 1., HU-3700 Kazincbarcika,
Hungary, Phone: +36-48 511 211, Fax: +36-48 511 511, Email: akos.korbacs@borsodchem.eu,
Website: www.borsodchem-group.com

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Műegyetem rkp. 3.
HU-1111 Budapest, Hungary, Phone: +36 1 463-1111, Fax: +36 1 463-1110,
Email: akos.korbacs@borsodchem.eu, Website: www.bme.hu

ABSTRACT

Chemical, biological, economic and mechanical feasibility review

Nitrate anion concentration is a huge deal at the waste water treatment plants, decreasing its amount is favourable. Well-known reagent was tested for industrial cleaning and extracting of dinitrotoluene (DNT) from red water which is a waste water of the toluene-diisocyanate (TDI) production. The capability of different extraction agents, such as nitrobenzene and toluene was studied. The toluene seemed to have a great efficiency, fewer DNT remain in the red water that is oxidized via Fenton oxidation could result fewer nitrate anions.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kémiai, biológiai, gazdasági és mechanikai megvalósíthatósági áttekintés

Nitrát anion koncentráció nagy probléma a szennyvíztisztító üzemben, csökkenteni a mennyiségét kedvező. Egy jól ismert reagens lett tesztelve dinitro-toluol (DNT) ipari minőségű tisztításra és extrahálásra a vörös vízből, ami a toluol-diizocianát termelés szennyvize. A különböző extraháló szerek képessége, mint nitrobenzol és toluol lettek kivizsgálva. Toluol eredményesnek tűnt, remek hatékonysága van, kevesebb DNT marad a vörös szennyvízben, amit Fenton oxidációs eljárásban oxidálnak és így kevesebb nitrát anion szabadul fel az eljárás során.

Kulcsszavak: Extrakció, CAD szimuláció, Fenton oxidáció, technológiafejlesztés, szennyvízkezelés

Reverzibilis kémiai hidrogéntárolás irídium-komplexekkel

Reversible Chemical Hydrogen Storage Using Iridium Complexes

KOVÁCS Henrietta¹, Dr. PAPP Gábor¹, Dr. PURGEL Mihály¹, Dr. KATHÓ Ágnes¹
Prof. Dr. JOÓ Ferenc^{1,2}, Dr. HORVÁTH Henrietta²

¹ Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

² MTA-DE Redoxi és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport
4032 Debrecen, Egyetem tér 1. tel.: (36)-52-512900,
e-mail: kovacsHenrietta@science.unideb.hu, web: fizkem.unideb.hu

ABSTRACT

Safe and secure hydrogen storage is a crucial aspect of harnessing renewable energy sources. The novel, iridium(I)-based, water soluble phosphine-NHC complexes, $\text{Na}_2[\text{Ir}(\text{emim})(\text{cod})(\text{mtppts})]$ and $[\text{Ir}(\text{cod})(\text{emim})(\text{mtppts})]$ have proven to be active catalysts in reversible formate-bicarbonate based hydrogen storage. We have investigated the formate-bicarbonate catalytic cycle in continuous flow microfluidic reactor. $[\text{Ir}(\text{cod})(\text{emim})(\text{mtppts})]$ proved to be highly effective in homogeneous phase reactions, while heterogenization of $\text{Na}_2[\text{Ir}(\text{emim})(\text{cod})(\text{mtppts})]$ on anion exchange resins resulted in active and stable heterogeneous catalysts.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az újrafelhasználható energiaforrásokból való folyamatos energiakinyeréshez fontos szempont a biztonságos hidrogéntárolás kérdése. Az újszerű, irídium(I)-alapú, vízzoldható foszfin-NHC komplexek; a $\text{Na}_2[\text{Ir}(\text{emim})(\text{cod})(\text{mtppts})]$ és az $[\text{Ir}(\text{cod})(\text{emim})(\text{mtppts})]$ hatékony katalizátornak bizonyultak a reverzibilis, formiát-hidrogénkarbonát alapú hidrogéntárolásban^{[1],[2]}. A formiát-hidrogénkarbonát katalitikus ciklust tanulmányoztuk folyamatos áramlású mikrofluidikai reaktorban, homogén, illetve heterogén fázisban is. Homogén fázisban az $[\text{Ir}(\text{cod})(\text{emim})(\text{mtppts})]$ komplex mutatott kiemelkedő aktivitást, míg a $\text{Na}_2[\text{Ir}(\text{emim})(\text{cod})(\text{mtppts})]$ komplex rögzítése anioncserélő gyantákon katalitikusan igen aktív és stabilis heterogenizált katalizátorokat eredményezett.

Kulcsszavak: irídium, katalízis, hidrogéntárolás, áramlásos reaktor, heterogenizálás

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-1 PD115535 és NKFI-FK128333) is.

[1] Horváth, H., Papp, G., Kathó, Á., Joó, F.: *Hung. Pat. Appl.* **2013**, P1300539; **WO 2015/040440 A2**.

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

DFT számítások sztereokémiai és sztereoszelektivitás meghatározására

DFT Calculations for Determination of Stereochemistry and Stereoselectivity

KOVÁCS Tibor, KIRÁLY Sándor, TÓTH László, SZAPPANOS Ádám,
Prof. Dr. ANTUS Sándor, Prof. Dr. KURTÁN Tibor, Dr. MÁNDI Attila

Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
tel.: +36/52/512-900, fax: +36/52/512-744, mandi.attila@science.unideb.hu, kurtan.tibor@science.unideb.hu, <http://szerves.science.unideb.hu>

ABSTRACT

The Density Functional Theory (DFT) methods are powerful tools for computation of optical parameters [1] of organic compounds and determination of stereochemistry. It is also possible to compute the NMR parameters [2], thus relative configuration and planar structure can be determined. The theoretical methods provide opportunity for studying reaction mechanism and stereoselectivity of chemical reactions [3]. On the example of 8 synthetic chiral heterocyclic compounds the applicability of DFT methods is demonstrated to determine stereochemistry, planar structure and reaction mechanism.

ÖSSZEFOGLALÓ

A DFT módszerek hatékony lehetőséget kínálnak a vegyületek optikai paramétereinek számításához [1] és így sztereokémiájuk meghatározásához. Szintén lehetőség van NMR paraméterek [2] számítására a relatív konfiguráció és a planáris szerkezet meghatározására. Az elméleti módszerek lehetőséget nyújtanak reakciómechanizmusok [3] felderítésére és reakciók szelektivitásának értelmezésére is. Az előadásban 8 szintetikus királis heterocikluson mutatom be a DFT módszerek alkalmazhatóságát sztereokémia, planáris szerkezet és reakciómechanizmus meghatározására.

Kulcsszavak: DFT számítás, ECD, NMR, sztereokémia, sztereoszelektivitás

- [1] P. Sun, D. X. Xu, A. Mándi, T. Kurtán, T. J. Li, B. Schulz, W. Zhang, *J. Org. Chem.*, **2013**, *14*, 1050
- [2] Y.-M. Ren, Ch.-Q. Ke, A. Mándi, T. Kurtán, Ch. Tang, Sh. Yao, Y. Ye, *Org. Biomol. Chem.*, **2018**, *16*, 393
- [3] A. Mándi, I. Komáromi, A. Borbás, D. Szikora, I. P. Nagy, A. Lipták, S. Antus, *Tetrahedron Lett.*, **2011**, *52*, 1256

Királis tioéter-amin ligandumok szintézise és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata

Chiral Thioether-amine Ligands: Synthesis and Application in Catalysis

MAJOR Máté Miklós¹, RÖVID Gergő¹, Dr. LENDVAY György²,
Dr. BÉNYEI Attila³, Dr. BAKOS József¹, Dr. FARKAS Gergely¹

¹Szerves Kémia Intézeti Tanszék, Pannon Egyetem, Egyetem u. 10, 8200 Veszprém

²Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Magyar Tudományos Akadémia,
Magyar tudósok krt. 2., 1117 Budapest

³Gyógyszerészi Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, 4032 Debrecen

Tel.: +36 88 624 544, fax: +36 88 624 469,

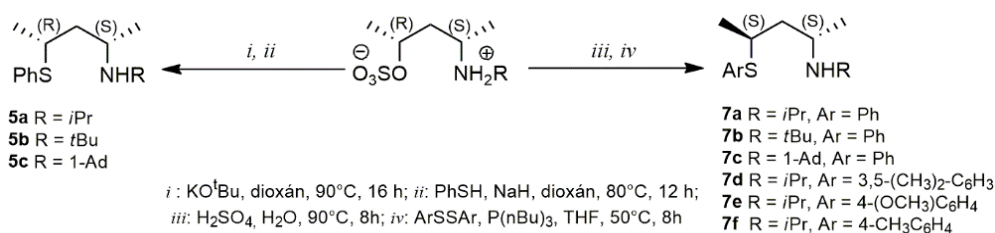
e-mail: miklos.mate.major@gmail.com, honlap: www.uni-pannon.hu

ABSTRACT

The stereoselective syntheses of optically active compounds represent a particularly important field of organic chemistry. One of the most convenient methodologies for such transformations is the transition metal catalyzed asymmetric synthesis that provides easy access to enantiopure synthons by using chiral metal complexes as catalysts. During our research two new synthetic routes were developed for the preparation of novel chiral thioether-amine type ligands. The coordination and catalytic properties of the new compounds were also evaluated. The catalysts modified by the air- and moisture stable N,S ligands provided excellent enantioselectivities (up to 93 % *ee*) and good activities in the palladium catalyzed alkylation reactions.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az optikailag tiszta vegyületek szelektív szintézise a szerves kémiai kutatások jelentős részét képezi. Az ilyen molekulák előállításának leghatékonyabb módja az aszimmetrikus szintézis, amely történhet királis átmenetifém komplexek alkalmazásával. Munkánk során új királis tioéter-amin ligandumok szintézisét dolgoztuk ki, majd tanulmányoztuk koordinációs és katalitikus tulajdonságait. Az új, levegővel és nedvességgel szemben ellenálló ligandumokkal képzett katalizátorok kiemelkedő enantioszelektivitást (93 % *ee*) és jó aktivitás biztosítanak palládium-katalizált szubsztitúciós reakciókban.



Kulcsszavak: tioéter-amin ligandum, kén inverzió, palládium katalízis, aszimmetrikus szintézis, DFT.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NKFIH K 115539 és K 128074 projektek, valamint az Új Nemzeti Kiválóság Program ÚNKP-18-3-I. keretében zajlott. Az utóbbi pályázat az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Kondo-csúcs felhasadása grafén kontaktusokhoz csatolt kvantumpöttyben

Splitting of the Kondo Peak in a Quantum Dot Attached to Graphene Contacts

Drd. MÁTHÉ Levente^{1,2}, Prof. Dr. Ioan GROSU²

¹Nemzeti Izotóp- és Molekulatechnológiai Kutató-Fejlesztő Intézet (INCDTIM), Molekuláris és Biomolekuláris Osztály, Kolozsvár, Donat utca, nr. 67-103, Cluj-Napoca, RO-400293, tel: 40-264-584037, fax: 40-264-420042, web: <http://www.itim-cj.ro>, e-mail: itim@itim-cj.ro

²Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár, Mihail Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel: 40-264-405300, fax: 40-264-591906 web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

ABSTRACT

We analyze the Kondo effect in a quantum dot attached to graphene leads in presence of a magnetic field. We use the pseudogap Anderson Hamiltonian to model the system and determine the retarded Green's function of the dot. In absence of a magnetic field, Kondo resonances show up in the dot's density of states at the chemical potentials of the contacts. These resonances split when applying a magnetic field. In the differential conductance, Kondo peak appears at the non-zero fixed chemical potential that splits up under a magnetic field.

ÖSSZEFOGLALÓ

Mágneses tér jelenlétében tanulmányozzuk a grafén érintkezőkkel rendelkező kvantumpöttyben megjelenő Kondo hatást. A rendszer modellezésére a pszeudo-sáv Anderson Hamilton operátort használjuk és meghatározzuk a kvantumpötty retardált Green-függvényét. Mágneses tér hiányában, a kvantumpötty állapotsűrűségben Kondo-rezonanciák jelennek meg az érintkezők kémiai potenciáljain, melyek mágneses tér hatására két csúcsra hasadnak fel. Kondo-csúcs mutatkozik a rögzített, nemnulla értékű kémiai potenciálon a differenciális vezetőképességben, mely mágneses tér hatására felhasad.

Kulcsszavak: Kondo-csúcs, Kondo-hatás, kvantumpötty, grafén.

Imidazolium-alapú ionfolyadékok alkalmazása fehérjék elválasztására kapilláris zónaelektroforézis módszerrel

Application of Imidazolium-based Ionic Liquids in the Separation of Proteins by Capillary Zone Electrophoresis

MEZŐ Emerencia, MSc^{1,2}, PÁGER Csilla, PhD^{1,2},
MAKSZIN Lilla, PhD^{1,2}, KILÁR Ferenc, DSc^{1,2,3}

¹Bioanalitika Intézet, Általános Orvostudományi Kar, Pécsi Tudományegyetem,
H-7624 Pécs, Szigeti út 12., tel.: +36 72 536-255, fax: +36 72 536-254,
e-mail: bioanalitika@aok.pte.hu

²Szentágotthai János Kutatóközpont, Pécsi Tudományegyetem,
H-7624 Pécs, Ifjúság útja 20.,

tel.: +36 72 501-668, fax: +36 72 501-654, e-mail: info@szkk.pte.hu

³Analitikai és Környezeti Kémiai Tanszék, Természettudományi Kar,
Pécsi Tudományegyetem, H-7624 Pécs, Ifjúság útja 6., tel.: +36 72 503-600, fax: +36 72 501-527, e-mail: kapcsolat@gamma.pte.ttk.hu

ABSTRACT

In this work, 1-Butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate and 1-Ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate ionic liquids were applied as coating material and background electrolyte in CZE for separating proteins such as cytochrome C, lysozyme, myoglobin, trypsin and transferrin. Our main aim was the optimization of the separation conditions, such as, the applied voltage, the concentration of the running electrolyte and the length of the capillary. The applicability of the method was also examined.

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során 1-butil-3-metil-imidazolium tetrafluoro-borát és 1-etil-3-metil-imidazolium tetrafluoro-borát ionfolyadékokat alkalmaztuk háttéreelektrolitként, illetve kapillárist bevonó anyagként fehérjék (citokrom c, lizozim, mioglobin, tripszin és apo-transzferrin) elválasztására kapilláris zónaelektroforézis módszerrel. Célunk az elválasztási paraméterek (feszültség, háttéreelektrolit koncentráció és kapilláris hossz) optimalizálása volt. A módszer alkalmazhatósága szintén tanulmányozásra került tojásfehérje és humán könnyminták segítségével.

Kulcsszavak: ionfolyadék, dinamikus bevonat, kapilláris zónaelektroforézis, fehérje, elválasztás technika

Termesztett gombafajok, illetve fajták összehasonlító vizsgálata klasszikus és noninvazív kémiai módszerrel

Comparative Analysis of Cultivated Mushroom Species and Varietis by NIR Spectrometry and Classical Analytical Method

Erika MIKOLA, Marietta FODOR

Szent István Egyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék,
1118 Budapest, Villányi út 29-43.
Tel.: +36(1)3057293
E-mail: Mikola.Erika@etk.szie.hu

ABSTRACT

The NIR, it can be seen more often that this environmental friendly, non-destructive, green chemical method is used for quality control and origin identification of different types of mushroom species. For the determination of the estimation function which is used to specify the protein content a PLS regression, a correlation was found with a mean error of 0.78 w/w% for a 96.65% determination coefficient (Q²). As a result of the performed LDA (linear discriminate analysis) examination, in case of *Agaricus bisporus* (Crimini) samples, we could separate with 95% confidence level the seven different variety.

The Project is supported by the European Union and co-financed by the European Social Fund (EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00005) and by Doctoral School of Food Sciences of SZIU.

ÖSSZEFOGLALÓ

A közeli infravörös technika (NIR) gyors, roncsolásmentes lehetőséget kínál különböző termesztett gomba fajok és fajták beltartalmi értékeinek valamint eredetazonosításának vizsgálatára.

A fehérje mérését PLS regresszió alapulva 0,78 m/m% átlagos hibával sikerült megvalósítani.

Agaricus bisporus (barna kalapú fajták) fajtafelismerése során lineáris diszkriminancia analízissel (LDA) a vizsgált 7 fajta elkülönítése 95%-os konfidencia szinten volt sikeres.

A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap (ESZA) társfinanszírozásával (EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00005) valamint a SZIE Élelmiszertudományi Doktori Iskola támogatásával valósult meg.

Kulcsszavak: FT-NIR, gombafaj/fajták, fajta elkülönítés, PLS regresszió, LDA

Aril-etinil-porfirin származékok szintézise, szerkezet- és fotofizikai tulajdonságaik vizsgálata

Synthesis, Characterization and Photophysical Properties of Aryl-ethynyl-porphyrins

MOLNÁR Éva-Andrea, GÁL Emese, BRÉM Balázs, Luminița SILAGHI-DUMITRESCU

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár
Arany Janos utca, 11 szám, postakód 400028, tel.: 40-264-591998, fax: 40-264-590818,
e-mail: molnar_evike@yahoo.com, www.chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

Porphyrin and phenothiazine are two heterocyclic systems with noticeable capacity for mediation of the energy/electron transfer processes. Due to the large planar π -conjugated structure and good photochemical/thermal stability, the star shaped *meso*-tetraaryl-porphyrins are considered to be useful materials for organic photoelectronic devices such as organic light emitting diodes (OLEDs), organic field-effect transistors (OFETs) and dye-sensitized solar cells (DSSCs) [1].

Starting from *meso*-phenothiazynil-porphyrin building blocks [2], the synthesis of new aryl-ethynyl-porphyrins are described. For the formation of ethynyl bridge we are used Sonogashira cross-coupling method in corresponding conditions [3]. The structures of obtained compounds were investigated by NMR and HRMS measurements, and the photophysical properties were evaluated according UV-Vis and fluorescence spectroscopic data.

ÖSSZEFOGLALÓ

A porfirin és fenotiazin származékok fotokémiai tulajdonságai közötti hasonlóságok lehetővé teszik ezek együttes tanulmányozását foto- és elektrokémiai folyamatokban. A fenotiazinil-porfirinek a kiterjedt lineáris π -konjugáció, valamint a magas hőstabilitás következtében jó közvetítővé válnak a különböző energia/elektron transzfer folyamatokban, így eredményesen alkalmazhatók szerves optoelektronikai eszközök (OLED, OFET, DSSC) gyártásában [1].

Az új aril-etinil-porfirin vegyületek előállítása Sonogashira kapcsolási reakcióval történt, palládium-réz katalizátorrendszer jelenlétében, kiinduló anyagként *mezo*-fenotiazinil-porfirint [2] és különböző aromás acetilén származékokat alkalmazva [3]. Az így előállított vegyületek szerkezetvizsgálata NMR- és tömegspektroszkópiás módszerrel, fotofizikai tulajdonságaik vizsgálata pedig UV-Vis és FL spektrofotometriás mérések alapján történt.

Kulcsszavak: porfirin, fenotiazin, Sonogashira kapcsolat, energia/elektron transzfer, fotofizikai tulajdonság

IRODALOM

- [1] Z. Xu, Q. Mei, Q. Hua, R. Tian, J. Weng, Y. Shi, W. Huang, *Journal of Molecular Structure*, **2015**, 1094, 1-8.
- [2] B. Brem, E. Gal, L. Gaina, C. Cristea, A. M. Gabudean, S. Astilean, L. Silaghi-Dumitrescu, *Dyes and Pigments*, **2015**, 123, 386-395.
- [3] P.K. Goldberg, T.J. Pundsack, K.E. Splan, *The Journal of Physical Chemistry A*, **2011**, 115, 10452-10460.

A *Saccharomyces cerevisiae* ferulinsav dekarboxiláz (ScFDC1) szubsztráttartományának vizsgálata

Exploring the Substrate Scope of Ferulic Acid Decarboxylase (FDC1) from *Saccharomyces Cerevisiae*

Drd. NAGY Emma Aletta Zsófia¹, Dr. NAGY Csaba Levente¹, Dr. TÓTÓ Róbert¹,
Dr. Paizs Csaba¹, Dr. BENCZE László Csaba¹

¹Biokatalízis és Biotranszformációk Kutatóközpont, Kémia és Vegyészmérnöki kar,
Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Arany János utca 11,
RO-400028 Kolozsvár, tel. 40-264-591998, fax: 40-264-590818
e-mail: n.zsofi@yahoo.com; csibencze@chem.ubbcluj.ro, web:
<http://www.chem.ubbcluj.ro/~csibencze>

ABSTRACT

Ferulic acid decarboxylase from *Saccharomyces cerevisiae* (ScFDC1) with prenylated Flavin mononucleotide cofactor (prFMN) provides the first enzymatic 1,3-dipolar cycloaddition mechanism. The high tolerance of the enzyme towards several non-natural substrates makes FDC1 an ideal enzyme for decarboxylation reactions leading to synthetically valuable styrenes. Our aim was to explore the substrate scope of ScFDC1, using *E.coli* whole-cell biocatalysts harbouring the *fdc1* gene of *S. cerevisiae*. Since earlier studies mostly focused on cinnamic acid derivatives with functional groups at the 4-position of the phenyl group, we were interested whether FDC1 accepts substituted cinnamic acids bearing different functional groups ($-\text{OCH}_3$, $-\text{CF}_3$ or $-\text{Br}$) at all positions of the phenyl ring (*o*-, *m*-, *p*-), as well as on several biaryl and heteroaryl cinnamic acid analogues or derivatives with extended alkyl chain.

ÖSSZEFOGLALÓ

A sörélesztőből (*Saccharomyces cerevisiae*) származó prenilált mononukleotid kofaktorról (prFMN) rendelkező ferulinsav dekarboxiláz (ScFDC1) mechanizmusa az 1,3-dipoláris cikloaddíciót követi. Úgy a kofaktor szerkezete, mint az enzimátikus reakció mechanizmusa egyedi és új a biokatalízis területén, növelve ezen enzim vizsgálata iránti érdeklődést. Mivel az FDC1 által katalizált dekarboxilezési reakciók értékes sztirol-származékokat eredményezhetnek, célunk ezen enzim szubsztráttartományának vizsgálata az enzim génjét hordozó *E. coli* egész sejt biokatalizátor alkalmazásával. Mivel korábbi tanulmányok a fahéjsav származékok fenilcsoportjának „*para*” helyzetű funkcionális csoportjainak vizsgálatára összpontosultak, vizsgálatunk során a fenilgyűrű különböző (*o*-, *m*-, *p*-) pozíciójában különböző funkcionális csoportokat ($-\text{OCH}_3$, $-\text{CF}_3$ vagy $-\text{Br}$) tartalmazó fahéjsav származékok, valamint számos biaril- és heteroaril-fahéjsav illetve hosszabb alkil-láncú származékok, szubsztrátként való viselkedését vizsgáltuk.

Multisztereogén, új típusú cinkona (tio)négyszetamid organokatalizátor szintézise és alkalmazása

Synthesis and Application of New Type Multistereogenic Cinchona (thio)squaramide Organocatalysts

NAGY Sándor¹, DARGÓ Gyula¹, KISSZÉKELYI Péter¹, SIMON András², PhD, MÁT-
RAVÖLGYI Béla¹, PhD, BARABÁS Júlia², HÖLTZL Tibor², PhD, HUSZTHY Péter¹, DSc,
KUPAI József^{1*}, PhD

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3., jkupa@mail.bme.hu,
<http://kupaorgchem.wixsite.com/organocatalysisbme>

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

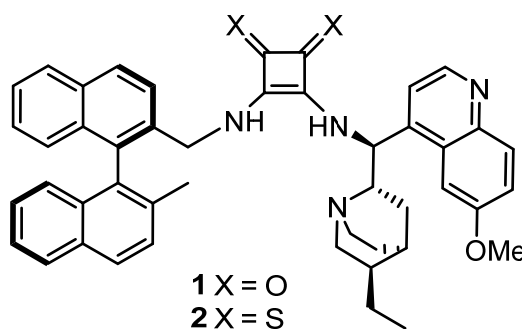
ABSTRACT

In our research group, new types of multistereogenic (thio)squaramide organocatalysts^{1,2} (**1** and **2**) were synthesized using commercially available starting materials. These catalysts were successfully applied in asymmetric *Michael* addition between acetylacetone and β -nitrostyrene, which is an important model reaction of the intermediates of several drug. High yields (up to 90%) and enantiomeric excesses (up to 98%) were achieved.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatócsoportunkban axiális és centrális kiralitással is rendelkező új típusú, bifunkciós (tio)négyszetamid organokatalizátorokat^{1,2} (**1** és **2**) állítottunk elő a kereskedelmi forgalomban könnyen elérhető kiindulási anyagokból. Ezen katalizátorokat sikerrel alkalmaztuk a számos gyógyszerhatóanyag intermediérének előállítására szolgáló aszimmetrikus modellreakcióban acetilaceton és β -nitrosztírol *Michael*-addíciójában kiváló termelési (>90%) és enantioszelektivitási (>98%) értékek mellett.

Kulcsszavak: organokatalizátor, cinkona, négyszetamid, tionégyszetamid, *Michael*-addíció.



Köszönettel tartozom az anyagi támogatásért: OTKA K112289, Servier-Beregi Doktorandusz ösztöndíj, Bolyai Kutatói ösztöndíj, ÚNKP-18-1-I.

[1] Rombola, M.; Rawal, V. H. *Org. Lett.* **2018**, 20, 514.

[2] Rombola, M.; Sumaria, C. S.; Montgomery, T. D.; Rawal, V. H. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139, 5297.

Nekroptózist moduláló humán fehérjék bioszintézise

Biosynthesis of Necroptosis Modulating Human Proteins

SALAMON Pál*, NAGY Katalin**, KOVÁCS Zita, ALBERT Beáta,
MIKLÓSSY Ildikó, LÁNYI Szabolcs, ORBÁN Csongor-K.

Sapientia EMTE, Csíkszeredai Kar, Biomérnöki tanszék, Csíkszereda, Szabadság Tér 1.
Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Kémiai Intézet, Pécs, Ifjúság útja 6.

**Faculty of Applied Chemistry and Materials Science, Politehnica University of Bucharest,
Bucharest, Romania, *salamonpal@uni.sapientia.ro

ABSTRACT

Any cell of multicellular organisms may be destroyed by apoptosis. In the last few years, several cell death pathways have been reported, including necroptosis, which according to a controlled program causes cell death. One of the key features of various tumors is to avoid apoptotic cell death. Normally, apoptosis inhibits necroptosis, so necroptosis is a promising process capable of destroying these tumors, as inhibition of apoptosis facilitates the activation of necrotic cellular pathways. Influence of immunological chemistry (tolerogenic, inflammatory, immunogenic) on cell lines may have a significant clinical benefit in reducing the tissue destruction of inflammatory processes, enhancing tumor immune response, neurodegenerative diseases, or tumors.

Our results may help to understand what mechanisms regulate the interaction of different cellular processes, thereby providing an opportunity to influence the intensity of the cell death and immunology output in the case of different pathologies.

Keywords: biosynthesis, necroptosis, RIPK1, RIPK3, MLKL, Caspase 9

ÖSSZEFOGLALÓ

A többsejtű élőlények bármely sejtje elpusztulhat apoptózissal. Az utolsó néhány évben több az apoptózistól független sejthalál útvonalat is leírtak, köztük a nekrozis egy típusát, a nekroptózist, mely szabályozott program szerint okozza a sejtek pusztulását.

A különféle tumorok egyik alapvető jellegzetessége az apoptotikus sejthalál elkerülése. Normál körülmények között az apoptózis gátolja a nekroptózis kialakulását, így nekroptózis egy ígéretes folyamat, mely képes lehet ezen tumorok elpusztítására, hiszen az apoptózis gátlása megkönnyíti a nekroptotikus sejthalál útvonalak aktivációját. A sejthalál útvonalak immunológiai kimenetének (tolerogén, inflammatorikus, immunogén) befolyásolása jelentős klinikai haszonnal járhat a gyulladásos folyamatok szövetdestrukciójának csökkentésében, a tumorok immunrendszer általi felismerésének fokozásában, a neurodegeneratív betegségek vagy a tumorok kezelésében.

Eredményeink segíthetnek annak megértésében, hogy milyen mechanizmusok szabályozzák a különféle sejthalál folyamatok egymásra hatását, ezáltal lehetőséget teremtenek a sejthalál intenzitásának és immunológia kimenetének befolyásolására különböző kórképek esetén.

Kulcsszavak: bioszintézis, nekroptózis, RIPK1, RIPK3, MLKL, Caspase 9

**Fenol fotokatalitikus bontása
egy TiO₂/WO₃/Au kompozitrendszerben.
Hatékonyság és köztitermék predikció**

**Photodegradation of phenol
in a TiO₂/WO₃/Au photocatalyst system.
Efficiency and degradation intermediate prediction**

SASZET Kata^{1,2,*}, PAP Zsolt^{1,3}, Vasile Mircea CRISTEA⁴, Lucian BAIA^{1,2}

¹ Nanustrukturált Anyagok és Bio-Nano Felületek Központja,
Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Kutatóintézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem,
Kolozsvár, Treboniu Laurian utca 42, RO-400271

² Fizika Kar, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár,
Mihai Kogălniceanu utca 1, RO-400084

³ Környezettudományi és Műszaki Intézet, Szegedi Tudományegyetem,
Tisza Lajos körút 103, Szeged, HU-6720

⁴ Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Babeş-Bolyai Tudományegyetem,
Kolozsvár, Arany János utca 11, RO-400028

**saszetkata@gmail.com*

ABSTRACT

In the present study TiO₂ based composites were prepared with the hierarchical addition of WO₃ and Au. The procedure involved combining three different parameters of the composites: the ratio of anatase and rutile crystal phase in the TiO₂, the ratio of WO₃ in the composite and the amount of Au on the TiO₂. The nanopowders were analyzed using XRD and DRS. Connections between the structure and the photocatalytic activity of the composites were investigated by UV light degradation of phenol. Degradation efficiency and the structure and quantity of degradation intermediates were evaluated. A feed forward, backpropagation artificial neural network (ANN) was created to model correlations given by experimental data. Based on the ANN predictions were made regarding the photocatalytic efficiency of composites within the TiO₂/WO₃/Au system.

Keywords: photocatalysis, composite, titanium dioxide, phenol, artificial neural network.

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen kutatás TiO₂, WO₃ és Au tartalmú kompozitok előállítását tűzte ki célul, három összetételi jellemzőt változtatva: az anatáz és rutil kristályfázis arányát a TiO₂-ban, a WO₃ mennyiségét a teljes kompozitban és az Au mennyiségét a TiO₂ felületén. A nanoporok szerkezeti és optikai tulajdonságait XRD és DRS mérések által állapítottuk meg. A kompozitok szerkezete és fotokatalitikus aktivitása közötti összefüggéseket fenol fotokatalitikus bontása során vizsgáltuk UV fényben. A bontási hatékonyság és a keletkező köztitermékek szerkezete és mennyisége szintén tanulmányozva volt. Egy előrecsatolt, hiba visszaterjesztéses mesterséges neurális hálózatot (ANN) hoztunk létre, a kísérleti eredmények modellezése végett. Az ANN-re alapozva megbecsülhető a kompozitok fotokatalitikus hatékonysága a TiO₂/WO₃/Au rendszeren belül.

Kulcsszavak: fotokatalízis, kompozit, titán-dioxid, fenol, mesterséges neurális háló, ANN.

Spiro-cikloalkil-piridazinonok szintézise

Synthesis of Spiro-cycloalkyl-pyridazinones

SEPSEY FÜR Csilla¹, SZIGETVÁRI Áron³, Dr. DÉKÁNY Miklós³, HERCZEG Barbara²,
Dr. GERENCSE János², Dr. MAKARA Gergely², prof. Dr. HAZAI László¹,
prof. Dr. KEGLEVICH György¹, prof. Dr. BÖLCSKEI Hedvig^{1*}

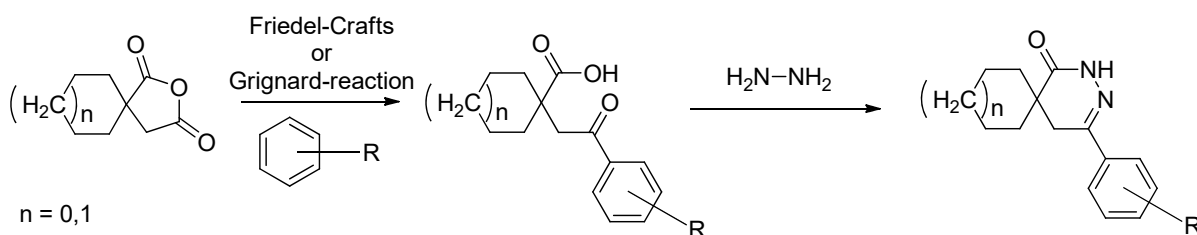
¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia
Tanszék, 1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.

²ComInnex Zrt. 1031 Budapest, Záhony u. 7.

³Richter Gedeon Nyrt., Budapest 10, Pf. 27., H-1475

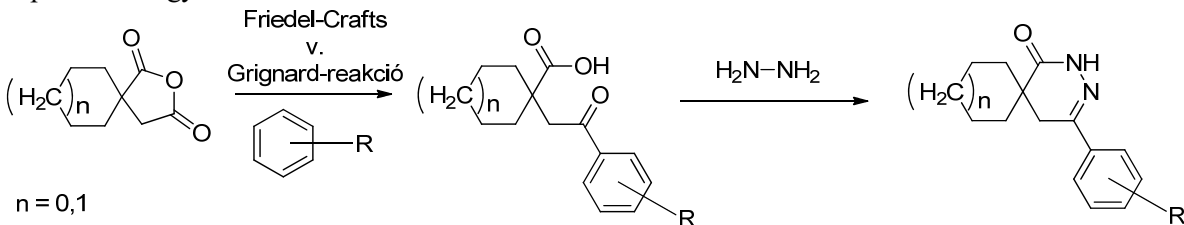
ABSTRACT

In drug research, attention is paid to the improvement of the physicochemical properties of the drug-candidate molecules. One possibility for this is to replace aromatic systems with heteroaromatics and/or to synthesize molecules with high fsp³ character. Taking this into account, we aimed at the synthesis of spirocycloalkyl pyridazinones. Starting from the 2-oxaspiro[4,5] decane-1,3-dione, the corresponding ketocarboxylic acid was obtained by both Friedel-Crafts and Grignard reaction, followed by hydrazine to form the pyridazinone ring.



ÖSSZEFOGLALÓ

A gyógyszerkutatás során, egyre nagyobb figyelmet szentelnek a gyógyszerjelölt molekulák, fizikokémiai tulajdonságainak a fejlesztésére. Ennek egyik lehetősége az aromás rendszerek heteroaromással történő helyettesítése illetve a magas fsp³ karakterű molekulák szintézise. Ezt figyelembe véve célul tűztük ki spiro-cikloalkil-piridazinonok szintézisét. A 2-oxaspiro[4,5]dekán-1,3-dion-ból kiindulva a megfelelő ketokarbonsav előállítását, mind Friedel-Crafts, mind Grignard-reakcióval vizsgáltuk, majd hidrazinnal kialakítottuk a piridazinon gyűrűt.



Kulcsszavak: Friedel-Crafts reakció, Grignard-reakció, fsp³ karakter, spiro, piridazinon.

Koronaéter alapú fluoreszcens szenzormolekulák szintézise és vizsgálata

Synthesis and Studies of Crown Ether Based Fluorescent Sensor Molecules

SZABÓ-SZENTJÓBI Hajnalka¹, MÁRTON Anna¹, PÁL Dávid¹,
TÓTH Tünde (PhD)¹, HUSZTHY Péter (DSc)¹

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.
Szupramolekuláris Kémia Kutatócsoport, +36-1-463-2111, hajni.szentjobi@gmail.com

ABSTRACT

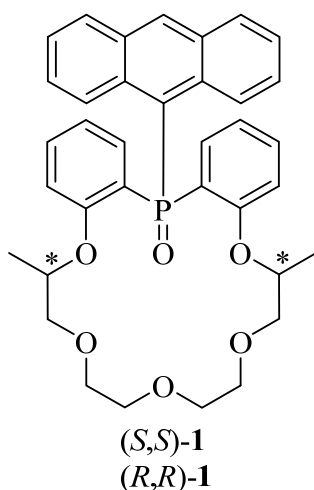
Novel enantiopure monophospha-18-crown-6 ether-based sensor molecules containing an anthracene fluorophore unit ((*S,S*)-**1** and (*R,R*)-**1**) were synthesized. Their enantiomeric recognition abilities toward the enantiomers of 1-phenylethylamine hydrogen perchlorate, 1-(1-naphthyl)-ethyl-amine hydrogen perchlorate, phenylglycine methyl ester hydrogen perchlorate, and phenyl-alanine methyl ester hydrogen perchlorate were examined using fluorescence spectroscopy.

Keywords: chiral, sensor molecule, crown ether, fluorescence spectroscopy, enantiomeric recognition

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során antracén fluorofór egységeket tartalmazó, új, enantiomertiszta monofoszfa-18-korona-6 éter alapú szenzormolekulákat ((*S,S*)-**1** és (*R,R*)-**1**) állítottunk elő. Vizsgáltuk ezen makrociklusok enantiomerfelismerő-képességét fluoreszcens spektroszkópiával, 1-feniletílamín hidrogén-perklorát, 1-(1-naftil)-etilamin hidrogén-perklorát, fenilglicin-metilészter hidrogén-perklorát és fenilalanin-metilészter hidrogén-perklorát sókkal szemben.

Kulcsszavak: optikailag aktív, szenzormolekula, koronaéter, fluoreszcens spektroszkópia, enantiomer felismerés



A CCMV kapszidfehérje klónozása, heterológ expressziója és molekuláris dinamikai szimulációja

Cloning, Heterologous Expression and Molecular Dynamics Simulation of the CCMV Capsid Protein

SZÖVÉRFI János^{1,3}, Dr. Ing. ORBÁN Kálmán-Csongor²,
Prof. Dr. Ing. LÁNYI Szabolcs^{1,2}, Dr. FEJÉR Szilárd³

¹Universitatea Politehnică București, Facultatea de Chimie Aplicată și Știința Materialelor,
Str. Gh. Polizu, Nr. 1-7, Sector 1, 011061 București, Tel: +4021-402 39 27,
e-mail: cristina.orbeci@upb.ro, www.chimie.upb.ro

² Universitatea Sapientia, Facultatea de Științe Economice, Socio-Umane și Inginerești Miercurea
Ciuc, Piața Libertății nr. 1., Miercurea Ciuc, 530104, județul Harghita,
Tel: +40-266-314-657, e-mail: mircureaciuc@sapientia.ro

³ Fundația Provitam, str. Caisului nr. 16, Cluj-Napoca, Tel: +40-264-430-175,
e-mail: fundatie@provitam.ro

ABSTRACT

The main topic of our research is *in vitro* and *in silico* studies on the CCMV capsid protein. The complete CCMV capsid forms through a hierarchical self-assembling process in which the proteins aggregate into dimers and pentamer of dimers. By investigating the basic units we can understand in detail how the capsid is formed.

The genes of the active part of CCMV protein was cloned into pET-19b ubiquitous fusion partner containing an expression vector, followed by expression of the protein in *E. coli* BL21 (DE3) Rosetta cells.

The dimers and pentamer of dimers were used to perform long time-scale classical molecular dynamics simulations in implicit and explicit solvent.

ÖSSZEFOGLALÓ

Fő kutatási irányunk a CCMV kapszidfehérje *in vitro* és *in silico* tanulmányozása. A CCMV vírus kapszidja hierarchikus önszerveződés során épül fel, a fehérjék dimerekké, majd a dimerek pentamerekké történő összekapcsolódásával. Az alapegységek vizsgálata hozzásegít a kapszid kiépülésének pontosabb megértéséhez.

A CCMV fehérje aktív részét kódoló gén szekvenciáját ubiquitin fúziós partnert tartalmazó pET-19b expressziós vektorba klónoztuk, majd *E. coli* BL21 (DE3) Rosetta sejtek segítségével végeztük el az expressziót.

A dimereket és a dimerek pentamerjeit hosszú időtartamú klasszikus molekuláris dinamikai szimulációknak vetettük alá implicit és explicit oldószeres közegben.

Kulcsszavak: molekuláris dinamikai szimuláció, heterológ expresszió, fehérje-fehérje kölcsönhatás, vírus kapszid, CCMV

Kitozán bevonatok permeabilitásának vizsgálata nedvesedési és impedancia spektroszkópiai módszerekkel cink hordozókon

Characterizing the Permeability of Chitosan Coatings on Zinc by Wetting and Impedance Spectroscopy Studies

SZŐKE Árpád Ferenc¹, Dr. SZABÓ Gabriella Stefánia¹, Dr. Liana Maria MUREȘAN¹,
Dr. ALBERT Emőke², Dr. HÓRVÖLGYI Zoltán²

¹Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki kar,
Kolozsvár, Arany János utca 11. szám, Tel. 0040-264-591998, <http://www.chem.ubbcluj.ro>
Email: szokearpad@chem.ubbcluj.ro

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék,
Kolloidkémia Csoport, Magyarország, 1111 Budapest, Budafoki út 6-8.
+36-1-463-1111/5772; http://www.fkt.bme.hu/~colloid/index_h.html

ABSTRACT

Chitosan (Chit) coatings can provide temporary protection for metal surfaces. The protective properties can be improved by impregnating the coatings with additives. In this study, the permeability of chitosan coatings impregnated by indigo carmine (IC) was indirectly studied using wetting measurements (sessile drop method, captive bubble method) and by electrochemical impedance spectroscopy on zinc substrates. Results show that the impregnated coatings have a lower permeability and the anticorrosive properties of the Chit-IC system (>90%) are better than that of the native chitosan. This can be explained through the ionic cross-linking of the linear chitosan molecules in the coatings, which will hinder the access to the metal surface of the corrosive species

Keywords: chitosan coatings, indigo carmine, electrochemical impedance, zinc substrate, wetting properties

ÖSSZEFOGLALÓ

A kitozán (Chit) bevonatok alkalmazhatóak fémfelületek átmeneti védelmére. A védőhatás adalékanyagok impregnálásával tovább javítható. Indigó kárminnal (IC) impregnált kitozán-bevonatok permeabilitását vizsgáltuk indirekt módon nedvesítési (ülőcsepp módszer, tapadó buborék módszer) és elektrokémiai impedancia spektroszkópiás módszerrel cink hordozókon. Az impregnált bevonatok kisebb permeabilitással rendelkeznek, a Chit-IC rendszer korrózióvédő hatása nő (>90%-kal) a kitozánhoz képest. Ennek lehetséges magyarázata a lineáris kitozán mátrix ionos térhálósítása, mely gátolja a korrózív szpecíeszek hozzáférését a fémfelülethez.

Kulcsszavak: kitozán bevonatok, indigó kármin, elektrokémiai impedancia, cink szubsztrátum, nedvesítési vizsgálatok

Köszönetnyilvánítás: A kutatás Domus junior kutatói pályázat támogatásával történt. A kutatás a "BME K+F+I stratégia" projektjének keretében készült, megvalósítását a TÁMOP 4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002 program támogatta.

Triszubsztituált 4- és 5-karboxamido-triazolok szintézise cikloaddíciós és aminokarbonilezési reakciókban

Synthesis of 4- and 5-carboxamidotriazoles Via Azide-alkyne Cycloaddition–aminocarbonylation Sequence

SZUROCZKI Péter¹, SÁMSON Judit¹, KOLLÁR László^{1,2,3}

¹Pécsi Tudományegyetem, Szervetlen Kémia Tanszék,
7624 Pécs, Ifjúság útja 6., tel.: (36) 72-503-600

²Szentágothai János Kutatóközpont, 7624 Pécs, Ifjúság útja 20., tel.: (36) 72-501-668

³MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport, 7624 Pécs, Ifjúság útja 6.

ABSTRACT

During the last decade the polysubstituted triazoles have received considerable attention in the scientific research (*e.g.* pharmaceutical chemistry, homogeneous catalysis). The application of transition-metal catalysts and organometallic reagents facilitates the efficient and selective synthesis of more complex triazole structures, moreover diverse functionalisation of these compounds under mild reaction conditions. In this study, 1,4-disubstituted 5-iodotriazoles were synthesised via **copper-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition reaction of iodoalkynes and** 1,4-disubstituted 5-iodotriazoles obtained from alkynyl Grignard reagents. The selective palladium-catalysed aminocarbonylation of these heterocyclic iodoarenes, *i.e.* the synthesis of the corresponding carboxamides, was carried out in the presence of several primary amines.

ÖSSZEFOGLALÓ

A többszörösen szubsztituált triazolok az elmúlt évtized kutatásaiban (gyógyszerkémia, homogén katalízis) jelentős figyelmet kaptak. Az átmenetifém-katalizátorok és fémorganikus reagensek alkalmazása lehetővé teszi a bonyolultabb szerkezetű triazolok hatékony és szelektív szintézisét, valamint azok változatos funkcionálizálását kíméletes reakciókörülmények között. Munkánk során különböző jód-alkinekből kiindulva réz(I)-katalizált 1,3-dipoláris cikloaddíció reakciókörülményei között állítottunk elő 1,4-diszubsztituált 5-jód-triazolokat, továbbá alkinil Grignard-reagensek felhasználásával 1,5-diszubsztituált 4-jód triazolokat. Ezen heterociklusos jódaromások palládium-katalizált szelektív aminokarbonilezését, azaz a megfelelő amidok előállítását sikeresen hajtottuk végre számos primer amin jelenlétében.

Kulcsszavak: triazol, homogén katalízis, palládium-komplex, cikloaddíció, aminokarbonilezés

Köszönetnyilvánítás: Köszönet illeti a Richter Gedeon Talentum Alapítványt munkám anyagi támogatásáért.

Fényfüggő változások a búza szabad aminosav anyagcseréjében

Light-dependent Changes in Free Amino Acid Metabolism of Wheat

TOLDI Dávid¹, Dr. KOCSY Gábor², SIMONNÉ Prof. Dr. SARKADI Livia¹

¹Szent István Egyetem Élelmiszertudományi Kar Élelmiszerkémiai és Táplálkozástudományi Tanszék; H-1118 Budapest, Somlói út 14-16. <https://etk.szie.hu/>

²Magyar Tudományos Akadémia Agrártudományi Kutatóközpont, Mezőgazdasági Intézet; H-2462 Martonvásár, Brunszvik utca 2. <http://www.agrar.mta.hu/>

ABSTRACT

The effect of light-dependent changes on free amino acids at metabolites and gene expression level was studied in wheat (*Triticum aestivum* ssp. *aestivum* variety *Chinese Spring*). Wheat seedlings were grown either at different light intensities (low, normal or high) or at different light spectra (enriched with blue, red or far-red components) in hydroponics for two weeks. The changes in gene expression and the concentrations of amino acids showed significant differences depending on light intensity and spectral composition.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kutatásunk során a búza (*Triticum aestivum* ssp. *aestivum* variety *Chinese Spring*) szabad aminosav tartalmának fényfüggő változását vizsgáltuk metabolit és génexpresszió szintjén. A búzánövényeket három különböző fényintenzitáson (alacsony, normál és magas) és három különböző spektrális összetételű fényen (kék, vörös vagy távoli vörös fénnel gazdagított) neveltük hidroponikus körülmények között két héten keresztül. A génkifejeződés és az aminosav koncentráció változása szignifikáns különbséget mutatott mind a fény intenzitása, mind spektrális összetétele függvényében.

Kulcsszavak: búza, fotoszintézis, fényerősség, fény spektrum, aminosavak, génexpresszió

Köszönetnyilvánítás: A kutatás anyagi fedezetét az NKFIH pályázatai (ANN 117949, TÉT_15_AT-1-2016-0048) biztosították.

Kommunális szennyvíztisztítás hatékonyságának növelése különböző szabályozási stratégiák alkalmazásával: matematikai modellezés és szimuláció

Increasing the Efficiency of Municipal Wastewater Treatment by Different Control Strategies: Mathematical Modelling and Simulation

ing. VÁRHELYI Melinda¹, Dr. ing. CRISTEA Vasile-Mircea¹, ing. BREHAR Marius¹

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
RO-400028 Kolozsvár, Arany János utca 11, Tel.: +40 264 593 833, Fax: +40 264 590 818,
www.chem.ubbcluj.ro, e-mail: mvarhelyi@chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

This research presents the benefits of applying aeration, return activated sludge flow and nitrate recirculation control at a municipal Wastewater Treatment Plant (WWTP). It was demonstrated by mathematical modelling and simulation that the investigated control strategies improve the effluent quality and reduce the operational costs. The studied control strategies were tested on a calibrated WWTP simulator. The dynamic WWTP simulator based on the Benchmark Simulation Model No. 1 (BSM1) and the Activated Sludge Model No. 1 (ASM1) was implemented in Matlab and the Simulink graphical extension.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kutatás a levegőztetés, az eleveniszap visszavezetése, illetve a nitrát recirkuláció szabályozásának előnyeit mutatja be egy kommunális szennyvíztisztítóban. Matematikai modellezéssel és szimulációval bizonyítottuk, hogy a tanulmányozott szabályozási stratégiák javítják a tisztított szennyvíz minőségét és csökkentik az üzemeltetési költségeket. A szabályozási stratégiákat egy kalibrált szennyvíztisztító szimulátoron vizsgáltuk. A dinamikus szennyvíztisztító szimulátort, amelynek alapja az 1-es számú Teljesítményvizsgáló Szimulációs Szennyvíztisztító Modell (BSM1) és az 1-es számú Eleveniszapos Modell (ASM1), Matlabban és a Simulink grafikus kiterjesztésben valósítottuk meg.

Kulcsszavak: szennyvíztisztítás, modellezés, szabályozási stratégia, Matlab, Simulink

Az ózon és Fenton-reakció hatásának vizsgálata valós tejipari szennyvizek membránszűrése során

Investigation of the Effect of Ozone and Fenton Reaction on Membrane Filtration of Real Dairy Wastewater

ZAKAR Mihály¹, FARKAS Dániel Imre², Prof. Dr. KESZTHELYI-SZABÓ Gábor²,
Dr. HANCZNÉ-LAKATOS Erika¹, Dr. LÁSZLÓ Zsuzsanna¹

¹Institute of Food Sciences, Széchenyi István University,
H-9200 Mosonmagyaróvár, Lucsony str. 15-17.

²Department of Process Engineering, Faculty of Engineering, University of Szeged,
H-6725 Szeged, Moszkvai krt. 9., Hungary
E-mail: *zakarmihaly05@gmailc.oom

ABSTRACT

In the present study real dairy waste waters were filtered through PES membranes, after ozone and Fenton pretreatment. This study aimed to investigate the effect of ozonre and Fenton-reaction as pretreatment before ultrafiltration of real dairy wastewaters. Fluxes, filtration resistances and pollutant retentions were determined and compared.

Keywords: membrane separation, membrane fouling, real dairy wastewater, ozone, Fenton

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során valós tejipari szennyvizeket tisztítottunk PES membránon való szűréssel, ózon és Fenton-reakcióval történő előkezelés után. Jelen munka célja az ózon és Fenton-reakció előkezelésként való alkalmazásának vizsgálata valós tejiparis szennyvizek ultraszűrése előtt. A szűrés során elérhető fluxusokat, szűrési ellenállásokat és szennyezőanyag visszatartásokat vizsgáltunk és hasonlítottunk össze.

Kulcsszavak: membránszűrés, membráneltömődés, valós tejipari szennyvíz, ózon, Fenton

Köszönetnyilvánítás: A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj, illetve a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatásával (NKFI témaszám: K112096) készült.

A keverő típusú előmelegítők alkalmazásának előnyei a nagy teljesítményű erőművi blokkok tápvíz-előmelegítésénél

Advantages of Using Direct Contact Feedwater Heaters in High Performance Steam Power Plants

Dr. ÁRPÁD István, PhD egyetemi adjunktus

Debreceni Egyetem TTK, Kémiai Intézet, Alkalmazott Kémiai Tanszék
4032 Debrecen, Egyetem tér 1., e-mail: arpad.istvan@science.unideb.hu

ABSTRACT

In steam power plants, the feedwater is preheated by Shell and Tube heat exchangers, with water on the tube side. The heating steam is flowing from the turbines. However the use of open or direct contact heaters is also possible in these power plants since the steam and the water are derived from the same water-steam cycle. Mixing of material streams of heat exchanger does not cause technological problems because these materials have the same chemical quality. The presentation investigates the general advantages of using direct contact heaters from steam power plants' point of view.

Keywords: steam power plant, water-steam cycle, direct contact or open feedwater heaters, reduction of the amount of corrosion products

ÖSSZEFOGLALÓ

A hőerőművek tápvíz-előmelegítésére felületi, csöves hőcserélőket alkalmaznak. A csöves hőcserélők fűtőgőze a turbinák megcsapolásaiból származik. Azonban erre a célra a keverő hőcserélők alkalmazása is megfelelő lehet, mert az előmelegítésre használt fűtőgőz és a tápvíz ugyanabból a körfolyamati közegből származik. A hőcserélő közegek összekeveredése technológiai problémát nem okoz, mert gyakorlatilag kémiaiilag azonos minőségűek. Az előadás elemzi a keverő hőcserélőkkel történő technológiai megoldás általános műszaki előnyeit.

Kulcsszavak: hőerőmű, víz-gőz körfolyamat, keverő hőcserélő, korróziós termék csökkentés

Új típusú Diels-Alder adduktot tartalmazó poliuretánok

Polyurethanes Containing New Type Diels-Alder Adduct

CZIFRÁK Katalin¹, LAKATOS Csilla¹,
KARGER-KOCSIS József², ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹ Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Tel.: (36)-52-512900/22480, Fax: (36)-52-518662, czifrak.katalin@science.unideb.hu

² Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Polimertechnika Tanszék,
1111 Budapest, Eötvös József u. 1.

Tel.: (36)-1-463-2003, Fax: (36)-1-463-1527, karger@pt.bme.hu

ABSTRACT

Polymers containing Diels-Alder adduct have a large family. The presence of adduct may not only improve the mechanical properties, in addition that the shape memory property of the polymer, but it also provides a thermoreversible bond. For this purpose, new types of Diels-Alder adducts were prepared and tested for their incorporation into a polyurethane chain by determining the mechanical properties of the polymers.

ÖSSZEFOGLALÓ

A Diels-Alder adduktot tartalmazó polimerek népes családdal rendelkeznek. Az addukt jelenléte nemcsak javíthatja a polimer mechanikai tulajdonságait, emellett az alakemlékezőképességet, hanem termoreverzibilis kötést is biztosít. E célból új típusú Diels-Alder adduktokat állítottunk elő és vizsgáltuk poliuretánláncba történő beépíthetőségüket a polimerek mechanikai tulajdonságainak meghatározása révén.

Kulcsszavak: Diels-Alder addukt, termoreverzibilitás, poliuretán, húzóvizsgálat

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: NKFI-116465, NKFI-128783 és a GINOP-2.3.2-15-2016-00041, amely az Európai Unió támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Módosított gumibitumen, mint SMA alapanyag nagyterhelésű alkalmazásokra

Modified Rubber Bitumen as an SMA Feedstock For Heavy Duty Application

GERGÓ Péter¹, KÁROLY Balázs^{1,2}, Dr. GEIGER András², Dr. HOLLÓ András^{1,2}

¹Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék,
8200 Veszprém, Egyetem u. 10., www.vmfweb.uni-pannon.hu

²MOL Nyrt., 2440 Százhalombatta, Olajmunkás u. 2., www.mol.hu

ABSTRACT

In our experiments, commercial rubber bitumen was modified to produce binder for heavy duty mastics asphalt (SMA). For the modification, gilsonite and LDPE were used in 1, 2 and 3% concentration. We primarily studied changes in flow properties using a dynamic shear rheometer. It was found that the doped samples had a higher stiffness in a broad temperature and frequency range, with the remark that the high temperature flexible properties should be further improved. The more favourable results were achieved with the gilsonite additive.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kísérleteink során kereskedelmi gumibitument módosítottunk nagy terhelésű masztix aszfalt (SMA) kötőanyag előállítására céljából. A módosításra gilzonitot és LDPE-t alkalmaztunk 1, 2 és 3 % koncentrációban. Elsősorban a folyási tulajdonságok változását vizsgáltuk dinamikus nyíróreométer segítségével. Megállapítottuk, hogy az adalékolt minták széles hőmérséklet és frekvenciatartományban nagyobb merevséggel rendelkeztek, azzal a megjegyzéssel, hogy a magas hőmérsékletű rugalmas tulajdonságokat tovább kell javítani. A kedvezőbb eredményeket gilzonit adalékkal érték el.

Kulcsszavak: modifikált gumibitumen, gilzonit, LDPE, masztix aszfalt, reológia

Hozzájárulások az élelmiszeripari etilalkoholos erjesztés kinetikai paramétereinek meghatározásához és a matematikai modellek tökéletesítéséhez a tervezés és működtetés fejlesztése céljából

Contributions to the Determination of Ethanol Fermentation Kinetic Parameters in the Food Industry and Mathematical Model Improvement for Design and Operation Development

Dr. ing. GOMBOS Sándor, adjunktus

Sapientia EMTE, Csíkszeredai Kar, Élelmiszertudományi Tanszék,
RO-4100 Csíkszereda, Szabadság tér 1. Románia
tel: 00 40 266 314 657, fax: 00 40 266 372 099,
gombossandor@uni.sapientia.ro, www.sapientia.ro

ABSTRACT

Ethanol fermentation in the scientific literature contain proposed differential equation systems by different authors, the parameter values significantly determine the quality of mathematical models. In fact, kinetic parameter values are not constant, these are also functions that require the use of a large number of variables to achieve more realistic simulations.

Keywords: ethanol fermentation, mathematic model, kinetic parameters, process parameters, simulation

ÖSSZEFOGLALÓ

Az etilalkoholt előállító fermentáció számára a tudományos szakirodalomban több szerző által alkotott differenciálegyenlet rendszer található, ezekben található paraméterek értékei lényegesen meghatározzák a matematikai modellek minőségét. A kinetikai paraméterek értékei tulajdonképpen nem állandók, ezek tulajdonképpen ugyancsak függvények, amelyek változóinak minél nagyobb számának felhasználására van szükség valósághűbb szimulációk elérése céljából.

Kulcsszavak: etilalkoholos erjesztés, matematikai modell, kinetikai paraméterek, műveleti paraméterek, szimuláció

Molekulaszerkezetében nagy hidrogéntartalmú középedesztillátumok előállítása

Production of Middle Distillates with High Hydrogen Content in the Molecular Structure

Dr. HOLLÓ András^{1,2}, Dr. HANCSÓK Jenő¹,
TÓTH Orsolya¹, VISNYEI Olivér¹, SÁROSSY Gábor²

¹Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.,
www.vmfiweb.uni-pannon.hu

²MOL Nyrt., 2440 Százhalombatta, Olajmunkás u. 2., www.mol.hu

ABSTRACT

Stricter environmental legislation and automotive requirements, furthermore the increasing needs of customers and the market competition push crude oil refineries to develop better and better quality conventional and alternative fuels. Since non-paraffinic molecules (like olefins, aromatics, polyaromatics and oxygen containing compounds) are limited in the diesel fuel standards and automotive charters the focus of our work was to produce paraffinic middle distillates with high hydrogen content in the molecular structure. In this lecture the main results obtained by converting waste and non-food based alternative feedstocks into high quality diesel fuel blending components are summarised.

ÖSSZEFOGLALÓ

A szigorodó környezetvédelmi előírások és autóiipari követelmények, továbbá a vásárlók növekvő igényei és a piaci verseny arra készítetik a kőolajfinomítókat, hogy egyre jobb minőségű hagyományos és alternatív motorhajtóanyagokat fejlesszenek ki. Mivel a nem paraffinos molekulák (mint az olefinek, aromás vegyületek, poliaromások és oxigéntartalmú vegyületek) a dízel szabványokban és az autóiipari előírásokban korlátozottak, munkánk során a molekulaszerkezetében nagy hidrogéntartalmú paraffinos középedesztillátumok előállítására fókuszáltunk. Az előadásban összefoglaljuk azokat a főbb eredményeket, amelyeket a hulladékok és a nem élelmiszer alapú alternatív alapanyagok, kiváló minőségű dízelüzemanyag keverőkomponensekké történő átalakítása során nyertünk.

Kulcsszavak: molekulaszerkezetében nagy hidrogéntartalom, paraffinok, alternatív alapanyagok, középedesztillátumok

Amino-izocianoakridin származékok, mint potenciális sejtjelölők

Amino-isocyanoacridines as Potencial Cell Probes

KOVÁCS Sándor Lajos¹, NAGY Miklós¹, RÁCZ Dávid¹, NAGY Zsolt László¹,
BANKÓ Csaba², BACSÓ Zsolt², ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Tel.: (+36)-52-512900/22454, Fax: (36)-52-518662, applchem.science.unideb.hu

²Debreceni Egyetem, Általános Orvostudományi Kar,
Biofizikai és Sejtbiológiai Intézet
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

ABSTRACT

Acridine orange (3,6-bis(dimethylamino)acridine) as an acridinediamine type fluorochromatic stain, have become one of the most investigated class of fluorescent dyes. Amino-isocyanoacridines (ICAAs) as new members of multifunctional acridine orange (AO) type dye family have a number of additional favorable properties. They have enhanced solvatochromic emission range, low quantum yields ($\Phi_F=2.9-0.4\%$) in water, reduced basicity ($pK_a=7.05-7.58$). These dyes are well-applicable with conventional epifluorescence imaging. Furthermore, diMICAaC is optimally suited as a whole-cell probe for both the conventional microscopic and the laser-illumination studies.

ÖSSZEFOGLALÓ

A fluoreszcens festékek egyik meghatározó képviselője az akridin narancs (3,6-bis(dimetilamino)akridin). Ezen vegyületsalád egy új tagjai az amino-izocianoakridin és metilezett származékai, melyek számos kedvező tulajdonsággal gazdagítják fluoreszcens festéksaládjukat. Széles emissziós spektrummal, vízben alacsony kvantumhasznosítási tényezővel ($\Phi_F=2.9-0.4\%$) valamint alacsony bázicitással rendelkeznek. Ezek a festékek, tulajdonságaik miatt, jól használhatóak sejtalkotók jelölésére, valamint a dimetilezett származék (diMICAaC) kiválóan alkalmazható mind az általános, mind fluoreszcens mikroszkópiai vizsgálatokban.

Kulcsszavak: akridin narancs, izocianid, szolvatokróm, fluoreszcens sejtfesték

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük az NKFI-116465, NKFI-128783 és a GINOP-2.3.2-15-2016-00041 pályázatok által nyújtott anyagi segítséget. Munkánkat az MTA Bolyai János Kutatói Ösztöndíj támogatta (Nagy Miklós). Az előadás az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4 (Bolyai+) kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

Vegyí anyagok gyors detektálása egészségügyi és higiéniai termékekben valós idejű közvetlen analízis ionizációs tömegspektrometriával (DART-MS)

Rapid Mapping of Various Chemicals in Personal Care and Healthcare Products by Direct Analysis in Real Time Mass Spectrometry (DART-MS)

KUKI Ákos, ZELEI Georgina, NAGY Lajos,
NAGY Tibor, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

ABSTRACT

Direct analysis in real time mass spectrometry (DART-MS) was used to characterize personal care and healthcare products, such as sanitary articles, sterile gauze bandages, nappies, plasters, without sample pre-treatment. More than 40 substances, a few of them presumably toxic, were detected and identified in seventeen different commercially available items. The identification was further confirmed for about half of the chemicals by DART MS/MS experiments. An efficient DART-MS analysis was developed to determine the concentration of nonylphenol ethoxylates.

ÖSSZEFOGLALÓ

Egészségügyi és higiéniai termékeket vizsgáltunk valós idejű közvetlen analízis ionizációs tömegspektrometriával (DART-MS). 17 kereskedelembe kapható cikkben mintegy 40 vegyszerkomponenst azonosítottunk. 20 komponens azonosítását tandem tömegspektrometriás vizsgálattal is megerősítettük. A detektált komponensek között számos toxikus hatású is található. DART-MS módszert dolgoztunk ki a nonifenol-etoxilátok mennyiségi meghatározására.

Kulcsszavak: valós idejű közvetlen analízis ionizációs tömegspektrometria (DART-MS), egészségügyi és higiéniai termékeket, nonifenol-etoxilátok

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: NKFI-116465, NKFI-128783, valamint GINOP-2.3.2-15-2016-00041 és GINOP-2.3.3-15-2016-00004, amelyek az Európai Unió támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósultak meg.

Poli(ω -pentadecalakton) építőelemet tartalmazó poliuretánok előállítása és vizsgálata

Preparation and Investigation of Polyurethanes Containing poly(ω -pentadecalactone) Building Blocks

LAKATOS Csilla¹, CZIFRÁK Katalin¹, KOVÁCS István Gergő¹,
ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Tel.: (36)-52-512900/22480, Fax: (36)-52-518662,
lakatoscsilla@science.unideb.hu

ABSTRACT

A new field of research in science is the preparation and investigation of biodegradable polymers. The incorporation of the biodegradable poly(ω -pentadecalactone) (PPDL) into a polymer chain resulted in a thermoreversible coupling element for shape-memory polyurethanes. During the production of polyurethanes we have changed the ratio and the order of attachment of the individual building blocks. The mechanical properties of the polymers were characterized by tensile test and Shore A hardness test.

ÖSSZEFOGLALÓ

A tudomány egy új kutatási területét képezi a biológiailag lebontható polimerek előállítása és vizsgálata. A biodegradábilis tulajdonságú poli(ω -pentadecalakton) (PPDL) polimer láncba történő beépítése thermoreverzibilis kapcsolóelemként szolgálhat, lehetővé téve, alakemlékező képességgel rendelkező poliuretánok előállítását. A poliuretánok előállítása során változtattuk az egyes építőelemek arányát és kapcsolódási sorrendjét. A polimerek mechanikai tulajdonságait szakítóvizsgálattal és Shore A keménységméréssel jellemeztük.

Kulcsszavak: poli(ω -pentadecalakton), biodegradábilis, poliuretán, szakítóvizsgálat

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: NKFI-116465, NKFI-128783, valamint GINOP-2.3.2-15-2016-00041, amely az Európai Unió támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Csontszövet regenerálódása réz tartalmú bioaktív üvegek felhasználásával

Copper Containing Bioactive Glasses for Bone Tissue Regeneration Trials

MAGYARI Klára¹, Radu A. POPESCU^{1,2}, PAP Zsolt^{1,3}, KÁSA Zsolt⁴,
TÓTH Zsejke-Réka⁴, Adriana VULPOI¹, Marian TĂULESCU⁵,
Sidonia BOGDAN⁵, Alexandra DREANCĂ⁵, Cristina LELESCU⁵, Emilia LICARETE¹,
Dan C. VODNAR⁶, Ionel PAPUC⁵, HERNÁDI Klára⁴, Lucian BAIA^{1,2}

¹Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Kutatóintéze, Babeş-Bolyai Tudományegyetem,
400084 Kolozsvár, M. Kogălniceanu 1, Románia

²Fizika Kar, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, 400084 Kolozsvár, M. Kogălniceanu 1, Románia

³Környezettudományi és Műszaki Intézet, Szegedi Tudományegyetem,
6720 Szeged, Tisza Lajos krt. 103, Magyarország

⁴Alkalmazott és Környezetkémia Tanszék, Szegedi Tudományegyetem,
6720 Szeged, Rerrich B. tér 1, Magyarország

⁵Állatorvosi Kar, Agrártudományi és Állatorvosi Egyetem,
400372 Kolozsvár, Monostori út 3-5, Románia

⁶Élelmiszertudományi és Tehnológiai Kar, Agrártudományi és Állatorvosi Egyetem,
400372 Kolozsvár, Monostori út 3-5, Románia

ABSTRACT

One of the important advantages of bioactive glasses consists in their bone bonding ability. By changing the glass composition, besides the bone bonding ability, other favorable properties can be attributed to these materials usable in medicine. For example copper shows antibacterial effect and exerts angiogenic and wound-healing responses both *in vivo* and *in vitro*. In the first step, sol-gel method was used to obtain silicate based bioactive glasses containing copper. The obtained results demonstrated that bioactive glasses with 0.5 and 1.5 mol% CuO content have excellent cell viability and antibacterial effect against *Staphylococcus aureus*. In the second step, bioactive glasses with alginate and pullulan natural polymer were combined to use it as support for *in vivo* tissue regeneration. The performed assessment on the composites indicated that the materials can be considered suitable candidates for future bone regeneration applications.

Keywords: composites, biocompatibility, cell viability, *in vitro*, *in vivo*

ÖSSZEFOGLALÓ

A bioaktív üvegek legfontosabb jellemzője a hegszövet képződés nélküli spontán kötődés az élő szövethez. Az üveg összetétel megváltoztatásával, a csonthoz kötődőképességük mellett, olyan anyagokat állíthatunk elő, amelyek orvosi alkalmazásokban előnyös tulajdonságokkal rendelkeznek. Például a réz antibakteriális hatása mellett, *in vitro* és *in vivo* körülmények között sebgyógyító hatással rendelkezik. Első lépésként sikeresen előállítottunk szol-gél módszerrel különböző réz tartalmú szilikát alapú bioaktív üvegeket. A kapott eredmények azt mutatták, hogy 0,5 and 1,5 mol% CuO tartalmú bioaktív üvegek kitűnő sejt életképességet indukál, valamint antibakteriális hatást mutattak ki *Staphylococcus aureus*-al szemben. Második lépésben a bioaktív üveget természetes alginát és pullulan polimerrel kombináltuk, hordozóként felhasználva *in vivo* szövet regenerálódás céljából. A kompozitokon elvégzett kísérletek azt mutatják, hogy a továbbiakban az anyagok használhatók csontregenerálási alkalmazásokban.

Kulcsszavak: kompozitok, biokompatibilitás, sejt-életképesség, *in vitro*, *in vivo*

Acknowledgements/ Köszönetnyilvánítás: This work was supported by a grant of the Romanian National Authority for Scientific Research and Innovation, CNCS-UEFISCDI, project number PN-III-P1-1.1-TE-2016-1324.

A 2,6-toluilén-diizocianát alkoholokkal történő reakciójának kinetikai vizsgálata katalizátor nélkül és katalizátor jelenlétében

Reactions of 2,6-Toluene Diisocyanate with Alcohols: Kinetic Studies in the Absence and Presence of Catalysts

NAGY Lajos, NAGY Tibor, KUKI Ákos, OLÁH Réka, LAKATOS Csilla,
ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék,
4032 Debrecen Egyetem tér 1, Magyarország

ABSTRACT

The kinetics of the reaction between 2,6-toluene diisocyanate (2,6-TDI) and alcohols with varying carbon chain lengths and a primary or secondary hydroxyl group in the absence and presence of tin(II) 2-ethylhexanoate (TEH) as a catalyst were studied. The alcohols were applied in high molar excess relative to 2,6-TDI to obtain a pseudo-first-order dependence on 2,6-TDI. Based on the kinetic results, it was found that (i) 2,6-TDI reacts faster with alcohols with longer carbon chains than those with shorter ones, (ii) secondary alcohols are approximately 3 times less reactive towards 2,6-TDI than primary ones, and (iii) after the first isocyanate group has been reacted, the reactivity of the remaining isocyanate group decreases. Furthermore, the rate constants were found to depend linearly on catalyst concentration.

ÖSSZEFOGLALÓ

A 2,6-toluilén-diizocianát (2,6-TDI) alkoholokkal történő reakciójának kinetikai vizsgálatát végeztük katalizátor alkalmazása nélkül, illetve ón(II)-bisz-(2-etilhexanoát) katalizátor jelenlétében. A reakciók során az alkoholt nagy feleslegben alkalmaztuk, ezáltal pszeudo-elsőrendű reakciót valósítottunk meg. A mérési eredmények alapján kimutattuk, hogy a 2,6-TDI nagyobb sebességgel reagál a hosszabb szénláncú alkoholokkal, valamint, hogy a másodrendű alkoholok reaktivitása körülbelül harmada az elsőrendű alkoholokénak. Megállapítottuk továbbá, hogy az egyik izocianát csoport reakciója után a másik izocianát csoport reaktivitása csökken. Kimutattuk, hogy a katalizátor koncentráció és a sebességi állandók között lineáris összefüggés van.

Kulcsszavak: kinetika, 2,6-toluilén-diizocianát, poliuretán, alkohol, katalizátor

Köszönetnyilvánítás

Köszönetünket fejezzük ki az NKFI-116465, az NKFI-128783 és a GINOP-2.3.2-15-2016-00041 pályázatoknak az anyagi támogatásért.

Rendkívül kis molekulatömegű, Izocianonaftalin alapú fluoreszcens szolvatokróm festékek analitikai alkalmazása Higany(II) és Ag(I) egyidejű, szelektív kimutatására

Isocyanonaphthalenes as Extremely Low Molecular Weight Selective, Ratiometric Fluorescent Probes for Both Mercury(II) and Silver (I)

NAGY Miklós¹, RÁCZ Dávid¹, KOVÁCS Sándor Lajos¹
ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹ Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Tel.: (+36)-52-512900/22454, Fax: (36)-52-518662, applchem.science.unideb.hu

ABSTRACT

Amino-isocyanonaphthalenes (ICANs) turned out to be highly selective, fluorescent, ratiometric Hg²⁺ sensors in aqueous medium. Until now they are the lowest molecular weight fluorophores reported for this purpose. In addition to their easy preparation and nontoxic nature they are also able to selectively sense Ag⁺ ions, which is unique among fluorescent sensors. The basis of this double selectivity is the reduction of the isonitrile moiety to amine by a chemical reaction with Hg²⁺ resulting in a greater than 100 nm hypsochromic shift of the emission maximum relative to ICAN, whereas the complexation of Ag⁺ with the NC group yields an approximately 30 nm bathochromic shift. In contrast, other common ions have little effect on the position of the emission maximum in aqueous medium.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az általunk kifejlesztett N-szubsztituált ICAN származékok alkalmazhatóságát vizsgáltuk Hg²⁺ és Ag(I) egyidejű, szelektív, fluoreszcenciás, vizes közegű kimutatására. Könnyű előállíthatóságuk és nemtoxikus jellegük mellett ezek az eddig erre a célra alkalmazott legkisebb molekulatömegű vegyületek. A Hg(II) kimutatása az izocianid csoporttal történő reakciót követő 100 nm-t meghaladó hipsochróm eltolódásból, míg az ezüsté a szintén az izociano csoporttal történő komplexálódással járó 20-30 nm-es batokróm eltolódásból történik. A Hg(II) kimutatási határa néhány 10 nanomól/liternek adódott.

Kulcsszavak: higany, izocianid, szolvatokróm, ezüst, fluoreszcencia, analitika

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük az NKFI-116465, NKFI-128783 és a GINOP-2.3.2-15-2016-00041 pályázatok által nyújtott anyagi segítséget. Munkánkat az MTA Bolyai János Kutatói Ösztöndíj támogatta (Nagy Miklós). Az előadás az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4 (Bolyai+) kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

Tömegmaradék analízis, robosztus módszer kopolimerek tömegspektrumának elemzésére

Mass-Remainder Analysis: A Robust Method for Evaluation of Copolymer Mass Spectrum

NAGY Tibor, KUKI Ákos, NAGY Lajos, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem Alkalmazott Kémiai Tanszék,
H-4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

ABSTRACT

Copolymer characterization is a challenge of analytical chemistry due to the complexity of the samples. The components cannot be separated by traditional chromatographic techniques. Mass spectrometry offers unique potential because the copolymers chains can be separated based on their m/z values. However, the numerous number of detected peaks make the evaluation complicated and require effective sorting pre-evaluation. The Kendrick Mass Defect (KMD) analysis is widely applied to identify homolog series, mass filtering and visualization of complex mass spectra. KMD analysis was used for copolymer analysis, however the data processing generate overlaps and require high resolution and accuracy. Therefore a new data mining tool is introduced, called as **Mass Remainder Analysis (MARA)**. The sorting process is done by the remainders after the division with the exact mass of one monomer unit. The remainders allow to determine the composition of the polymer chains. Thus make possible to calculate the compositional drift, number average and weight average numbers of monomer units.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kopolimerek karakterizálása manapság is komoly kihívást jelent az analitikai kémia számára. A tömegspektrometria egyedi lehetőséget nyújt ezek vizsgálatára, mivel a különböző összetételű láncok azok m/z értéke alapján elválaszthatóak. Mérések során nagy mennyiségű adat keletkezik egy-egy spektrumban akár több ezer csúcs is megjelenhet, amely manuális kiértékelése gyakran lehetetlen. Ezért fontos megfelelő adatkezelési módszer alkalmazása. A Kendric tömegeltérés analízis (KMD) elterjedt módszer homológ sorozatok csoportosítására, tömegspektrumok szűrésére. Korábban már kopolimerek elemzéséhez is használták. A KMD analízis viszont átfedéseket generál az adatok kezelése során emellett nagy felbontást és nagy tömegpontosságot igényel. Ezért egy új adatkezelési módszert dolgoztunk ki, melynek neve a tömegmaradék analízis (**Mass Remainder Analysis, MARA**). A módszer a maradékokat alkalmazza az m/z értéknek az egyik monomer tömegével való osztása után. Ezáltal könnyen meghatározhatóak a különböző kopolimer láncok összetételei és meghatározható a összetétel változás, számátlag és tömegátlag monomer egységek száma.

Kulcsszavak: kopolimer, MARA, MALDI-TOF, tömegszűrés

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: GINOP-2.3.2-15-2016-00041, GINOP 2.3.3-15-2016-00021, NKFI-116465 és NKFI-128783.

Félvezető oxidok töltésszeparáción alapuló környezeti alkalmazhatósága: játék az elektronokkal egy tisztább környezetért

Semiconductor Oxides Applicability Based on Their Charge Separation Properties: Playing With the Electrons for a Cleaner Environment

PAP Zsolt^{1,2}

¹ Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet,
Tisza Lajos krt. 130, Szeged, HU-6720

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Nanustrukturált Anyagok és Bio-Nano Felületek Központja,
Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Kutatóintézete,
Treboniu Laurian utca 42, Kolozsvár, RO-400271

ABSTRACT

The semiconductors are now part in our everyday life in various applications. One of the most important application area of these materials is based on their ability to generate charge carriers using natural light sources. Photocatalysis is among these applications and it is based on the generation of electrons and holes, which can be further applied in the degradation of organic pollutants via reactive free radicals. The efficiency of the semiconductors is based on the charge separation yield, which is dependent on the quality of the semiconductor. Among the parameters which defines these materials are: the crystal shape (cubes, flowers, rods, spheres, stars, etc.), the presence of various crystal phases, the oxidation state of the surface atoms, primary crystallite size, hierarchical crystal size. The listed parameters can be efficiently tuned in the case of several materials, including TiO_2 , WO_3 , Cu_2O , ZnO , Bi_2WO_6 , etc. These nanostructures also can be replaced by their natural counterparts, such as rutile in the case of TiO_2 . The “beneficial” effect of the charge carriers can be the removal of organic pollutants. However, the reactive species generated by the photocatalysts ($\bullet\text{OH}$, $\bullet\text{O}_2^-$, etc) is the source of oxidative stress for several plants and animals. Therefore, it would be also wise, that nanostructures dedicated to several applications undergo an ecotoxicological assessment.

Keywords: semiconductors, photocatalysis, natural semiconductors, ecotoxicology

ÖSSZEFOGLALÓ

A félvezetők rengeteg, a jelen társadalom számára nélkülözhetetlen, alkalmazása van. Az egyik kiemelkedő és folyamatosan fejlődő területe a természetes napfény által generált töltésszeparáción alapuló alkalmazások sorozata. A fotokatalízis egyike ezeknek az alkalmazásoknak, amely során fény gerjesztés hatására töltéshordozókat hozunk létre úgy, hogy ezeket hasznosíthatjuk szerves vegyületek lebontására, az által, hogy reaktív gyököket hozunk létre. Ezeknek az anyagoknak a hatékonysága a töltések szétválaszthatóságától függ, amely maga módján függ az anyagminőségtől. Így olyan paraméterek kapnak szerepet, mint a kristálymorfológia szabályozása (kockák, rózsák, hasábok, rudak, gömbök, csillagok, stb.) a kristályfázisok aránya, a felületen lévő atomok oxidációs állapota, a primer krisztallitméret vagy éppen a hierarchikus kristályméret. Az említett paraméterek mindegyike finomhangolható több ilyen félvezető fotokatalizátornál, mint a TiO_2 , WO_3 , Cu_2O , ZnO , Bi_2WO_6 , stb. Továbbá ezek a nanostruktúrák helyettesíthetők természetes anyagokkal is, mint például a TiO_2 esetében a rutil ásvány. A töltéshordozók “jótékony” indirekt hatása tehát a sok szerves szennyező (modell- és valós szerves szennyezők) eltávolíthatósága/lebontása. Azonban a reaktív gyökök ($\bullet\text{OH}$, $\bullet\text{O}_2^-$, stb.) gondot okozhatnak több állat és növényfajnak oxidatív stressz által. Ennek jegyében a fotóaktív nanostruktúrákat, amelyeket fotokatalizátorként alkalmazni szeretnénk, mindenképp felülvizsgálatot igényelnek.

Kulcsszavak: félvezetők, fotokatalízis, természetes félvezetők, ökotoxikológia

Köszönetnyilvánítás: A szerző köszönetet mondok a Magyar Tudományos Akadémia Prémium Posztdoktori Pályázatának, illetve PN-III-P1-1.1-TE-2016-1588 jelű pályázatnak.

Szolvatokróm amino-izocianoantracén és -akridin származékok mint fiziológiás pH-érzékelők és bioszenzorok

Amino-isocyanoacridines: Solvatochromic Fluorophores as Physiological pH Probes and Biosensors

RÁCZ Dávid¹, NAGY Miklós¹, KOVÁCS Sándor Lajos¹,
NAGY Zsolt László¹, ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹ Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Tel.: (+36)-52-512900/22454, Fax: (36)-52-518662, applchem.science.unideb.hu

ABSTRACT

Amino-isocyanoacridines are novel, multifunctional acridine orange type solvatochromic fluorescent dyes with additional unique properties. They have low basicity, and their optical behavior could be fine-tuned by complexation with Ag(I) ions. Their vibronic absorption and the charge transfer bands allow these dyes to be applied as stable pH-probes with high precision in the physiological pH range using UV-Vis and fluorescence detection. These dyes are able to sense pH change as well in different microenvironments, such as the Stern layer – it was demonstrated on sodium dodecyl sulfate micelles.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatómunkánk során új, akridin narancs típusú, többfunkciós amino-izocianoakridin származékokat állítottunk elő, mint szolvatokróm festékanyagok, de ezen túl számos értékes tulajdonsággal is rendelkeznek. Enyhén bázikus karakterrel bírnak, Ag(I) ionokkal való komplexképzési hajlamuk pedig optikai tulajdonságaik finomhangolására ad lehetőséget. A festékanyagok rezgési abszorpciós és töltésátviteli sávjai kiválóan alkalmassá teszi ezen anyagokat a pH változásának pontos jelzésére a fiziológiás pH-tartományban, UV-Vis vagy fluoreszcenciás detektálást használva. A pH változását ezen kívül különböző mikrokörnyezetekben is meg lehet határozni segítségével, úgymint a Stern-rétegben, melyet a nátrium-dodecil-szulfát példáján mutatunk be.

Kulcsszavak: izocianid, szolvatokróm, fluorofor, akridin, pH-érzékelő

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük az NKFI-116465, NKFI-128783 és a GINOP-2.3.2-15-2016-00041 pályázatok által nyújtott anyagi segítséget. Munkánkat az MTA Bolyai János Kutatói Ösztöndíj támogatta (Nagy Miklós). Az előadás az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4 (Bolyai+) kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

**„Természetes” édesítőszer
D- és L-fruktóz tartalmának vizsgálata polarimetriával
és nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiával**

**Investigation of the D- and L-fructose
Content of “Natural” Sweeteners by Polarimetry
and high Performance Liquid Chromatography**

^{1,2}CSAPÓ János egy. tanár, ²ALBERT Csilla egy. adjunktus, ¹KISS Dóra PhD hallgató

¹University of Debrecen, H-4032 Debrecen, Egyetem sq,
1. Hungary, tel: 00 36 52 508 444,

email: csapo.janos@agr.unideb.hu, honlap: www.agr.unideb.hu

²Sapientia Hungarian University of Transylvania,

530104 Csíkszereda, Szabadság sq. 1. Romania,

email: csapo.janos@gmail.hu, honlap: www.sapientia.ro

ABSTRACT

Recently, in the commerce appeared natural sweeteners with 65% L-fructose content, which claims that they are natural fruit extracts possessing low glycaemic index. We have carried out tests to verify these claims, the optical rotation of the product was determined by polarimetry, and high performance liquid chromatography was used for the determination of the L- and D-fructose content. On the basis of polarimetric measurements was found that the aqueous solution of the product rotates the plane of polarized light significantly to the right direction, so the commercial sample does not contain exclusively L-fructose. The results of the tests were confirmed by the HPLC analysis, as large quantities of D-fructose was detected, while L-fructose was present only in trace amounts in the sample. We declare that the claim was false about the L-fructose content of the product, and we warn this way about the dangers of „natural” sweetener. In our lecture we presented the results and as well as the used analytical methods.

The participation on the conference was supported by Institute of Research Programs (KPI). The work/publication is supported by the EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00008 project. The project is co-financed by the European Union and the European Social Fund.

Keywords: D- and L-fructose, polarimetry, HPLC, detection of counterfeiting, analytical methods.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az utóbbi időben a kereskedelmi forgalomban megjelentek olyan termékek, amelyekről azt állítják, hogy gyümölcsből kivont, 65% L-fruktózt tartalmazó természetes édesítőszer, melynek glikémiás indexe alacsony, a vércukor szintet lassan emelik. Ezen állítások igazolására végeztünk vizsgálatokat, melyek során polariméterrel meghatároztuk a termék forgatóképességét, és nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiával (HPLC) az L- és a D-fruktóz tartalmát. A forgatóképesség alapján megállapítottuk, hogy a termék vizes oldata jelentős mértékben jobbra forgatja a poláros fény síkját, tehát a kereskedelmi minta semmiképpen nem tartalmazhat kizárólagosan L-fruktózt. A vizsgálatok eredményét a HPLC analízis megerősítette, melynek során a mintából nagy mennyiségben mutattunk ki D-fruktózt, míg az L-fruktóz csak nyomokban volt jelen. Kijelentjük, hogy a termékről az L-fruktóz tartalommal kapcsolatos állítás hamis, egyben felhívjuk a figyelmet a „természetes” édesítőszerrel közölt állítások veszélyeire. Előadásunkban az alkalmazott analitikai módszerekről is beszámolunk.

Kulcsszavak: L- és D-fruktóz, polarimetria, HPLC, hamisítás kimutatása, analitikai módszerek.

A thaumatin édesítőszer hamisítása, és ennek kimutatására alkalmas analitikai módszerek

Thaumatin Adulteration and the Analytical Methods for deTectiion of Thaumatin Counterfeiting

^{1,2}CSAPÓ János egy. tanár, ²ALBERT Csilla egy. adjunktus, ¹KISS Dóra PhD hallgató

¹University of Debrecen, H-4032 Debrecen,
Egyetem sq. 1. Hungary, tel: 00 36 52 508 444, fax: 00 36 52 486 292, email:
csapo.janos@agr.unideb.hu, honlap: www.agr.unideb.hu

²Sapientia Hungarian University of Transylvania,
530104 Csíkszereda, Szabadság sq. 1. Romania,
tel: 00 40 266 314 657, fax: 00 40 266 372 099,
email: csapo.janos@gmail.hu, honlap: www.sapientia.ro

ABSTRACT

The thaumatin is a protein composed of 207 amino acids, which is used as low-energetic sweeteners and taste modifier additive in the food industry. Two thousand times as sweet as sucrose, but its sweet taste develops slowly, nevertheless the sweet sensation takes longer in comparison with sugar. Since the compound is extremely expensive, the thaumatin is often falsified with sugars, sugar alcohols and artificial sweeteners. Detection and quantitative determination could be done by ninhydrine test, infrared spectrometry or UV spectrophotometry, (absorbance at 279 nm), and on the basis of the nitrogen content could be concluded the quality of the sample. The most specific detection method is the determination of the amino acid composition, since the fact of the counterfeiting can be predicted with high probability based on the nitrogen content and the amino acid composition. In our presentation we report the detection of counterfeiting of thaumatin with aspartame and other nitrogen- containing materials based on its amino acid composition.

The participation on the conference was supported by Institute of Research Programs (KPI). The work/publication is supported by the EFOP-3.6.3-VEKOP-16-2017-00008 project. The project is co-financed by the European Union and the European Social Fund.

Keywords: thaumatin, aspartame, detection of counterfeiting, analytical methods, nitrogen content determination, ion exchange column chromatography, amino acid analysis.

ÖSSZEFOGLALÓ

A thaumatin egy 207 aminosavból álló fehérje, melyet az élelmiszeriparban alacsony energiatartalmú édesítőszerként és ízmódosítóként alkalmaznak. Kétezerszer olyan édes, mint a répacukor, de íze csak lassan alakul ki, azonban az édes érzet a sokkal hosszabb ideig tart mint a cukornál. Mivel rendkívül drága anyagról van szó, a thaumatint előszeretettel hamisítják cukrokkal, cukoralkoholokkal és mesterséges édesítőszerrel. Kimutatása és mennyiségének meghatározása történhet ninhidrintesztel, infravörös spektrometriával vagy UV spektrofotometriával (279 nm hullámhosszon), valamint nitrogéntartalom alapján is következtethetünk a minta minőségére. A legspecifikusabb kimutatási módszer az aminosav-összetétel meghatározás, hisz a hamisítás ténye a nitrogéntartalom és az aminosav összetétel alapján nagy valószínűséggel megállapítható. Előadásunkban a thaumatin aszpartámmal és más nitrogéntartalmú anyagokkal történő hamisításának kimutatásáról számolunk be aminosav-összetétel mérése alapján.

Kulcsszavak: thaumatin, aszpartám, hamisítás kimutatása, analitikai módszerek, nitrogéntartalom meghatározás, ioncserés oszlopkromatográfia, aminosav analízis.

Új típusú ligandumok és komplexeik a vizes közegű fémorganikus katalízisben

New Ligands and Complexes in Aqueous Organometallic Catalysis

Prof. JOÓ Ferenc,^{1,2} Dr. KATHÓ Ágnes,¹ Dr. HORVÁTH Henrietta,²
Dr. PAPP Gábor,¹ Dr. UDVARDY Antal¹

¹Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

²MTA-DE Redoxi és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

4032 Debrecen, Egyetem tér 1. tel.: (36)-52-512900,

e-mail: joo.ferenc@science.unideb.hu, web: fizkem.unideb.hu

ABSTRACT

The most widely used catalysts in homogeneous aqueous organometallic chemistry are still comprised by metal complexes of tertiary phosphine ligands. However, metal complexes of *N*-heterocyclic carbene (NHC) ligands have gained extensive application recently, due to their outstanding catalytic properties (activity, selectivity) and to their great stability and variable ligand structures. Similarly, increasing attention is focussed on metal complexes of salen- and salan-type ligands containing an N₂O₂ donor atom set. With use of such complexes we have realized several catalytic processes in aqueous solutions or in aqueous-organic biphasic mixtures (hydrogenation, transfer hydrogenation, racemization, C-C cross-couplings).

ÖSSZEFOGLALÓ

A homogén fémorganikus katalízisben általánosan használt fémkomplex katalizátorok máig főleg terciér foszfin ligandumokat tartalmaznak. Az utóbbi időben azonban egyre nagyobb felhasználást nyernek az *N*-heterociklusos karbén (NHC) ligandumok fémkomplexei, köszönhetően kiváló katalitikus sajátságaiuknak (aktivitás, szelektivitás) továbbá nagy stabilitásuknak és a ligandumok sokoldalúan alakítható szerkezetének. Újabban egyre nagyobb figyelem irányul a szalén és szalán típusú (N₂O₂-donor) ligandumok komplexeire is. Ilyen típusú komplexek segítségével számos katalitikus reakciót valósítottunk meg vizes oldatban vagy vizes-szerves kétfázisú reakcióelegyekben (hidrogénezés, transzfer hidrogénezés, racemizáció, C-C kereszt-kapcsolások).

Kulcsszavak: NHC-ligandumok, szalén, szalán, hidrogénezés, racemizáció

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 és a GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. P. G. köszöni a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap támogatását (NKFI-1 PD115535).

Hangyasav bontása vízdoldható Ir-katalizátorral H-akceptor jelen- és távollétében

Decomposition of Formic Acid with Water-soluble Ir-catalyst in the Presence and Absence of H-acceptor

Dr. KATHÓ Ágnes,¹ HANKÓ György,¹ ÖLVETI Gábor,¹ Dr. UDVARDY Antal¹
Dr. PAPP Gábor,¹ Prof. JOÓ Ferenc^{1,2}

¹Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

²MTA-DE Redoxi és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

4032 Debrecen, Egyetem tér 1. tel.: (36)-52-512900,

e-mail: kathy.agnes@science.unideb.hu, web: fizkem.unideb.hu

ABSTRACT

The new water-soluble *cis-mer*-[IrH₂Cl(*mtp*ppms)₃] (*mtp*ppms = monosulfonated triphenyl-phosphine) was employed as a catalyst for selective decomposition of formic acid to H₂ + CO₂ in aqueous solution at *T* = 30–100 °C (TOF up to 298 000 h⁻¹). A sharp maximum in the reaction rate was observed at pH = 3.75; its coincidence with the p*K*_a of formic acid shows that both HCOOH and HCOO⁻ play important roles in the reaction mechanism. The same complex catalyses hydrogen transfer reactions of acetylenes from aqueous solutions of HCOOH-HCOONa, too. Conditions of the selective reduction of phenylacetylene to styrene were optimized and the scope of such reductions was investigated with several other alkynes.

ÖSSZEFOGLALÓ

A monoszulfonált trifenilfoszfint (*mtp*ppms) tartalmazó, vízdoldható *cis-mer*-[IrH₂Cl(*mtp*ppms)₃] nagy hatékonysággal (TOF = 298 000 h⁻¹) katalizálja a hangyasav H₂-né és CO₂-dá bomlását vizes oldatban *T* = 30–100 °C-on. Az átalakulás a sav p*K*_a-jának megfelelő pH = 3,75 oldatban a leggyorsabb, ami arra utal, hogy a mechanizmusban a HCOONa is szerepet játszik. Ugyanez a komplex katalizálja az acetilén HCOOH-HCOONa vizes oldatokkal végzett H-átviteli redukcióját is. A fenilacetilén sztirollá alakulásának körülményeit optimalizáltuk, és ugyanilyen paraméterek mellett más alkinek redukciót is megvizsgáltuk.

Kulcsszavak: Ir-komplex, monoszulfonált trifenilfoszfin, hangyasav, acetilén

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 és a GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. P. G. köszönetet mond a támogatásért a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-1 PD115535) is.

Foszfá-urotropin (PTA) módosítása oldószermentes közegben

Ball-milling Derivatization of Phospha-urotropine (PTA) Under Solvent-free Conditions

Dr. UDVARDY Antal¹, SZOLNOKI Csenge Tamara¹,
Prof. Dr. JOÓ Ferenc^{1,2}, Dr. KATHÓ Ágnes¹

¹Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék,

²MTA-DE Redoxi és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1. tel: (36)-52-512900
e-mail: udvardya@unideb.hu, web: fizkem.unideb.hu

ABSTRACT

Since the introduction of 1,3,5-triaza-7-phosphaadamantane (PTA) into homogeneous catalysis^[1]; this phoshine ligand, its derivatives and complexes have attracted ever increasing interest^[2]. In this work, N-, or P-alkylated ligands were prepared under solvent-free conditions in a ball mill. Novel air- and water tolerant P(V)-spirophosphorane-type PTA derivatives were synthesized without solvent, as well. Solid-state structures of the new compounds were determined by single crystal X-ray diffraction.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az 1,3,5-triaza-7-foszfáadamantán (PTA) homogén katalízisbe való bevezetése óta^[1] fokozódó érdeklődés van a vegyület és származékai, illetve komplexei iránt. Munkánk során N-, és P-alkilezett PTA vegyületeket állítottunk elő oldószermentes körülmények között, golyós malomban. Új, vízben és levegőn stabilis P(V)-spirofoszforán típusú PTA-származékokat állítottunk elő ugyancsak oldószermentes körülmények között. A képződő PTA-származékoknak meghatároztuk a molekulaszerkezetét is.

Kulcsszavak: oldószermentes reakciók, víz, foszfin, golyós malom, PTA

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2.-15-2016-00008 és a GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

[1] Darensbourg, D. J.; Joó, F.; Kannisto, M.; Kathó, Á. *Organometallics*, **1992**, *11*, 1990-1993

[2] Guerriero, A.; Peruzzini, M.; Gonsalvi, L. *Coord. Chem. Rev.*, **2018**, *355*, 328-361

Nav1.7 altípusú feszültségfüggő nátrium csatorna blokkolók szintézise

Synthesis of Voltage Gated Nav1.7 Sodium Channel Blockers

assoc. prof. Dr. BÖLCSKEI Hedvig^{1,2}, Dr. KOCSIS Pál¹,
Dr. KOLOK Sándor¹, Dr. TARNAWA István¹

¹Richter Gedeon Nyrt., Budapest 10, Pf. 27., H-1475,

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia
Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3. e-mail: h.bolcskei@mail.bme.hu

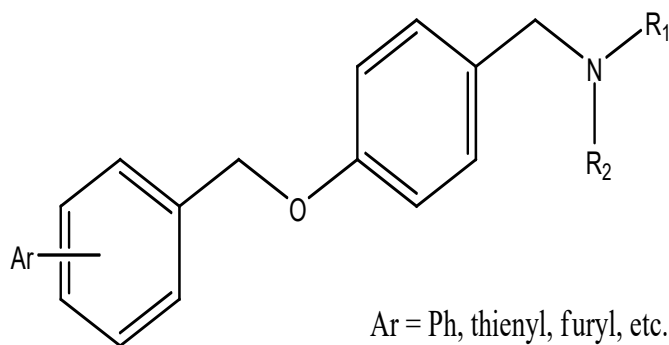
ABSTRACT

Our task was to design and synthesize new antagonists of voltage gated sodium channel Nav1.7 for the treatment of inflammatory pain. The benzyloxy-benzylamine compound family was a result of our high-throughput screening (HTS). Various derivatives were synthesized. The most efficient aryl and heteroaryl substituted benzyloxy-benzylamines were obtained by the Suzuki cross coupling reaction of the corresponding iodo derivatives. In case of a few derivatives the hERG activity could be avoided.

ÖSSZEFOGLALÓ

Célul tűztük ki új Nav1.7 altípusú feszültségfüggő nátrium csatorna blokkolók szintézisét a gyulladásos fájdalom kezelésére. A benziloxi-benzilamin vegyületcsaládot egy nagy áteresztő képességű szkrin eredményezte. Különböző származékokat szintetizáltunk. A leghatásosabb aril és heteroaril szubsztituált benziloxi-benzilaminokat a megfelelő jódszármazék Suzuki keresztkecsolási reakciójával nyertük. Néhány származék esetében a hERG aktivitást sikerült csökkenteni.

Kulcsszavak: nátrium csatorna blokkoló, Nav 1.7 altípus, szintézis, Suzuki reakció, benziloxi-benzilamin,



**„Molekula halászat. Mi marad a hálóban?”
Esettanulmányok a ligand-alapú virtuális
és *in vitro* biológiai szűrés integrált alkalmazására**

**„Ligand Fishing. What Stays in the Net?”
Case Studies for the Integrated Use of Ligand-based Virtual
and *In Vitro* Biological Screening**

Dr. DORMÁN György¹, Dr. HAJDÚ István^{1,2}, Dr. FLACHNER Beáta¹, Dr. DOBI Krisztina¹, SZASZKÓ Mária¹, Dr. MAGYAR Csaba², Dr. LŐRINCZ Zsolt¹, Dr. CSEH Sándor¹

¹Targetex Kft., H-2120 Dunakeszi, Madách Imre út 31/2., (dorman@targetex.com),

²MTA TTK Enzimológiai Intézet, H-1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.

ABSTRACT

The biological screening of *in silico* generated protein target focused compound libraries offers a viable alternative to the traditional high-throughput screening primarily due to its cost- and labor-efficiency; furthermore this strategy is particularly attractive for biotech companies lacking synthesis capacity. Databases having multi-million, commercial compound libraries are available for focused library selection (for „*ligand fishing*”). Similarity search based on the structure of known, active compounds that applies 2D molecular fingerprints performs well compared with the complex 3D methods and offers real time solution for generating focused libraries („*fishing tool*”). The above methods could be extended and refined with generating bioisosteric replacements and/or using 3D modelling. In the present lecture we describe the chemoinformatics methods followed by 3 case studies: generation of phosphodiesterase 5 and 4B, lysyl oxidase, and glutaminyl cyclase inhibitor focused libraries together with their *in vitro* biological screening. (determining: „*what stays in the net...?*”). Financial support: REG_KM_09-2-2009-0061; Eurostars-NEMZ_15: E!9360 NEWHS4PCR.

ÖSSZEFOGLALÓ

In silico generált fehérjecélpontokra fókuszált molekula könyvtárak biológiai szűrése alternatívát nyújt a klasszikus nagyáteresztőképességű szűréssel szemben, mivel költséghatékony, és ez a stratégia előnyös olyan biotech cégek számára, amelyek nem rendelkeznek szintetikus kapacitással. Mára a megvásárolható vegyületkönyvtárak multi-milliós nagyságrendű adatbázisai állnak rendelkezésre, amelyekből a fókuszált könyvtárakat kiválaszthatjuk (azaz „*kihalászhadjuk*”). A 2D molekuláris fingerprinten alapuló és már ismert aktív vegyületek szerkezetéből kiinduló hasonlósági keresés sikeresség és hatékonyság szempontjából felveszi a versenyt a komplex 3D módszerekkel és valós futamidő alatt képes fókuszált könyvtárak kiválasztására („*halászó eszköz*”). A módszert bioizosztér helyettesítők generálásával ill. 3D módszerekkel kiegészítve finomíthatjuk. Előadásunkban a kemoinformatikai módszereket ismertetjük és három esettanulmányt mutatunk be: foszfodiészteráz 5 ill. 4B gátló; lizil-oxidáz gátló; és glutaminil-cikláz gátló fókuszált könyvtárak kialakítását és *in vitro* biológiai szűrését tárgyaljuk (megállapítva, hogy „*mi marad a hálóban...?*”). A projektet támogatták: REG_KM_09-2-2009-0061 (Baross Gábor 2009); Eurostars-NEMZ_15: E!9360 NEWHS4PCR.

Kulcsszavak: focused library generation, 2D similarity search, phosphodiesterase 5 and 4B, lysyl oxidase, and glutaminyl cyclase inhibitor focused libraries.

Átmenetifémekkel módosított katalizátorok alkalmazása műanyag hulladékok pirolízise során: szintézisgáz előállítása

Transition Metal Modified Catalysts for the Pyrolysis of Waste Plastics: Syngas Production

GOMBOR Linda¹, AL-ASADI Mohammed¹, MISKOLCZI Norbert¹

¹Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék,
Egyetem u. 10, Veszprém, Tel: +36 88 624-000, honlap: www.uni-pannon.hu

ABSTRACT

The long term sustainable utilization of worldwide generated waste plastics is an actual field. The chemical recycling looks an attractive way for waste polymer utilization. The carbon chain of plastics can be converted into more valuable products during pyrolysis, e.g. synthesis gas, liquid hydrocarbons, raw materials for chemical synthesis, etc. In this work, the one stage pyrolysis of waste plastics was investigated using high temperature and catalysts in tubular reactor. The structure of the catalysts was modified by transition metal loading on their surface to increase the hydrogen yield. It was found that product yields and the composition can be significantly modified by bimetallic catalysts. Especially the amount of hydrogen, and branched compounds or aromatic hydrocarbons can be increased.

Keywords: plastic waste, pyrolysis, synthesis gas, transition metal loaded catalyst

ÖSSZEFOGLALÓ

A Földön keletkező műanyag hulladékok környezetvédelmi és energetikai szempontból hosszú távon is fenntartható hasznosítása korunk egyik aktuális tématerülete. A polimerek energiatartalmának hasznosítására az un. kémiai hasznosítás perspektivikus iránynak mutatkozik. A pirolízis során a műanyagok szénláncáértékesebb termékekké alakítható át, pl. szintézisgáz, folyékony szénhidrogének, vegyipari alapanyagok stb. Kutatómunkánk során lakossági műanyag hulladékok egylépcsős, magas hőmérsékletű hőbontását vizsgáltuk csőreaktorban katalizátorok jelenlétében. A hidrogén mennyiségének növelése céljából a katalizátorok szerkezetét módosítottuk, azokra átmenetifémeket vittünk fel. Megállapítottuk, hogy az átmenetifémek kombinálásával jelentősen módosítható a termékek hozamszerkezete és azok összetétele. Elsősorban a hidrogén mennyisége, az elágazó és az aromás szénhidrogének mennyisége növekedett.

Kulcsszavak: műanyag hulladék, hőbontás, szintézisgáz, átmenetifémekkel módosított katalizátor

Királis információkban gazdag, funkcionizált telített heterociklusok sztereokontrollált szintézisei gyűrűnyitó metatézissel

Stereocontrolled Access to Diolefinated Saturated Heterocycles with Multiple Stereogenic Centers Through Ring-opening Metathesis

BENKE Zsanett¹, NONN Melinda^{1,2}, KISS Loránd^{1*}

¹Institute of Pharmaceutical Chemistry and

²Stereochemistry Research Group of the Hungarian Academy of Sciences, University of Szeged, H-6720 Szeged, Eötvös u. 6, Hungary

Tel: +36-62-545561; <http://www2.pharm.u-szeged.hu/gyki>

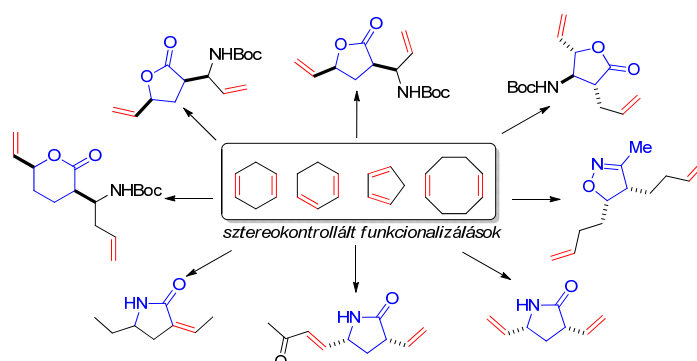
E-mail: kiss.lorand@pharm.u-szeged.hu; kiss.lorand00@pharm.u-szeged.hu

ABSTRACT

Metathesis represents a powerful tool for the creation of highly functionalized olefinated scaffolds [1-2]. Ring-opening metathesis (ROM) of some unsaturated, constrained bicyclic ring systems has been evaluated in the presence of some ruthenium-based catalysts. Starting from various cyclodienes, the derived corresponding bicyclic lactone, lactam or isoxazoline derivatives were subjected to ROM. These functionalized, strained bicyclic systems under ethenolysis afforded with stereocontrol, through the conservation of the configuration of the stereogenic centers of the starting compounds, novel diolefinated, highly functionalized heterocyclic scaffolds.

ÖSSZEFOGLALÓ

Olefinkötést tartalmazó molekulák szintéziseire a metatézis reakció az egyik gyakran alkalmazott eljárás. Különböző telítetlen, konformációsán gátolt biciklusos rendszerek (laktonok, laktámok, izoxazolinok) gyűrűjének nyitását hajtottuk végre gyűrűnyitó metatézis körülményei között, amelynek eredményeként sztereokontrollált módon új, királis információkban gazdag funkcionizált, háromdimenziós heterociklusos rendszerekhez jutottunk.



Kulcsszavak: metatézis, sztereokontroll, heterociklusok, funkcionizálás, sztereogén centrum

IRODALOM

- [1] Kiss, L.; Kardos, M.; Forró, E.; Fülöp, F. *Eur. J. Org. Chem.* **2015**, 1283–1289.
 [2] Kardos, M.; Kiss, L.; Haukka, M.; Fustero, S.; Fülöp, F. *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, 1894–1901.

Multivalens szénhidrátok szintézise és lektinekkel való kölcsönhatásának vizsgálata

Synthesis of Multivalent Carbohydrates and Investigation of their Interaction With Lectins

Dr. CSÁVÁS Magdolna¹, Dr. Lenka MALINOVSKÁ², Dr. Gita JANCARIKOVÁ²,
LE THAI Son¹, Dr. HERCZEG Mihály¹, Prof. E. KÖVÉR Katalin³,
Prof. Michaela WIMMEROVÁ², Prof. BORBÁS Anikó¹

¹Debreceni Egyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Gyógyszerészi Kémiai Tanszék,
Debrecen, 4032, Egyetem tér 1. Tel.: +3652512900/22742,

Email: csavas.magdolna@science.unideb.hu, Honlap: www.pharm.unideb.hu

²Central European Institute of Technology, Masaryk University,
Brno, Czech Republic and National Centre for Biomolecular Research, Faculty of Science,
Masaryk University, Brno, Czech Republic,
Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic

³Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar,
Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen, 4032, Egyetem tér 1.

ABSTRACT

In order to target multiple binding sites of lectins isolated from human pathogens, α -L-fucopyranoside- [1], β -D-galactopyranoside and α -(1-2)-linked thiomannobioside [2] containing di-, tri- and tetravalent glycoclusters and chimeras were synthesized using click-chemistry. The interactions between carbohydrate derivatives and bactericidal lectins were investigated by several biophysical methods and NMR techniques.

ÖSSZEFOGLALÓ

α -L-fukopiranozidot [1], β -D-galaktopiranozidot és α -(1-2)-kötésű tiomannobiozidot tartalmazó di-, tri- és tetravalens glikokonjugátumokat és kiméra vegyületeket állítottunk elő click-reakciók révén, melyek humán patogén baktériumokból izolált lektinek potenciális ligandumai. A lektin-szénhidrát kölcsönhatásokat biofizikai módszerek és NMR technikák segítségével jellemeztük.

Kulcsszavak: multivalencia, glikokonjugátumok, bakteriális lektinek, click-reakció, lektin-szénhidrát kölcsönhatások

Referenciák

[1] G. Jančaříková, M. Herczeg, E. Fújdíarová, J. Houser, K. E. Kövér, A. Borbás, M. Wimmerová and M. Csávás: Synthesis of alpha-L-fucopyranoside-presenting glycoclusters and investigation of their interaction with *Photobacterium agglutinans* lectin (PHL). *Chemistry - A European Journal*, **2018**, *24*, 4055. [2] M. Csávás, L. Malinovská, F. Perret, M. Gyurkó, Z. T. Illyés, M. Wimmerová, A. Borbás: Tri- and tetravalent mannoclusters cross-link and aggregate BC2L-A lectin from *Burkholderia cenocepacia*. *Carbohydr. Res.*, **2017**, *437*, 1.

A kutatás megvalósításáért köszönetet mondunk az alábbi támogatóknak: NKFIH (K119509, Csávás M.), Európai Unió és Európai Regionális Fejlesztési Alap (GINOP-2.3.2-15-2016-00008), MTA Bolyai János Posztdoktori Ösztöndíj (Csávás M. és Herczeg M.), az Emberi Erőforrások Minisztérium (ÚNKP-18-4 Új Nemzeti Kiválóság Program, Csávás M.), INTER COST (project No. LTC17076), European Regional Development Fund-Project „CIISB4HEALTH” (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_013/0001776).

Kén és szelén tartalmú szénhidrátszármazékok előállítása és biológiai vizsgálatuk

Syntheses of Sulfur and Selenium Containing Carbohydrates and Their Biological Studies

ILLYÉS Tünde Zita¹, E. KÖVÉR Katalin², FEHÉR Krisztina²,
Ambati Ashok KUMAR^{1,2}, Hans-Joachim GABIUS³, Jorge GONZÁLES⁴,
Marcelo COMINI⁵, SZILÁGYI László¹

¹ Szerves Kémiai Tanszék, ² Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék,
Debreceni Egyetem, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1., Magyarország

³ Fiziológiai Kémiai Intézet, Ludwig-Maximilians Egyetem, 80539 München,
Veterinär str. 13., Németország

⁴ Egészségtudományi Kar, Antofagastai Egyetem, P.f. 170, Antofagasta, Chile

⁵ Pasteur Intézet, Montevideo, Uruguay

ABSTRACT

Novel glycomimetics were synthesized by replacing the interglycosidic oxygen with a disulfide bond or selenium atom(s) in disaccharides. We found that the resulting aromatic oligovalent glycosyl disulfides and some diglycosyl disulfides are active against the parasites of *Trypanosoma cruzi* from different strains. Benzene-based mono- to trivalent dithiogalactosides, symmetrical selenodigalactoside and diselenodigalactoside were prepared and tested as promising ligands of biologically relevant lectins.

ÖSSZEFOGLALÓ

Új glikomimetikumokat szintetizáltunk oly módon, hogy a diszacharidokban az interglikozidos oxigént diszulfid hídra vagy szelén atom(ok)ra cseréltük. Az aromás multivalens glikozil diszulfidok és néhány diglikozil diszulfid aktív a különböző törzsekből származó *Trypanosoma cruzi* paraziták ellen. Benzol alapú mono- és multivalens ditio-galaktozidokat, szimmetrikus szeleno-digalaktozidokat állítottunk elő és ígéretes ligandumokként vizsgáltuk különböző, biológiailag releváns lektinekhez való kötődésüket.

Fluortartalmú piperidinvázas γ -aminosavszármazékok szintézisei

A Convenient Synthesis of Fluorine-containing Piperidine γ -amino Acid Derivatives

OUCHAKOUR Lamiaa,¹ ÁBRAHÁMI Renáta Anita,¹
NONN Melinda,^{1,2} KISS Loránd,^{1*}

¹Institute of Pharmaceutical Chemistry and ²Stereochemistry Research Group of the Hungarian Academy of Sciences University of Szeged, H-6720 Szeged, Eötvös u. 6, Hungary
Tel: +36-62-545561

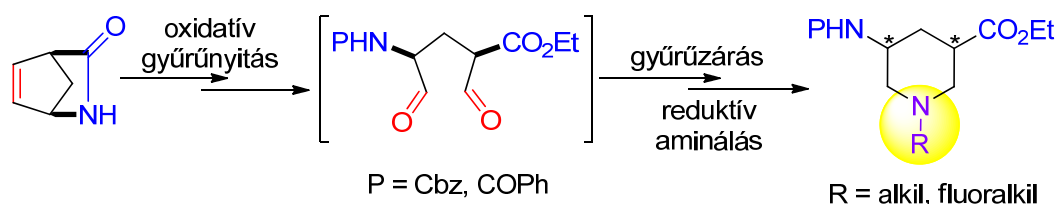
E-mail: kiss.lorand@pharm.u-szeged.hu; kiss.lorand00@pharm.u-szeged.hu
<http://www2.pharm.u-szeged.hu/gyki>

ABSTRACT

Fluorinated organic molecules have received increasing importance in pharmaceutical chemistry and drug research over the past ten years [1-2]. An efficient synthetic approach for the construction of fluorine-containing piperidine γ -amino acid derivatives has been described. The synthetic concept was based on oxidative ring opening of Vince-lactam through its olefinic bond, followed by double reductive amination of the diformyl intermediate performed with various fluoroalkylamines. The synthesized compounds may be regarded as valuable β,γ -diaminocarboxylate building scaffolds for the synthetic and peptide chemistry.

ÖSSZEFOGLALÓ

A fluortartalmú szerves molekulák egyre nagyobb jelentőséget nyertek a gyógyszerkutatásban az elmúlt évtizedben [1-2]. Biciklusos γ -laktámból kiindulva, fluortartalmú, piperidinvázus γ -aminosavszármazékok szintéziseit hajtottuk végre. A szintézisút kulcslépése, a Vince-laktám olefinkötésének oxidatív hasításával nyert diformil intermedier továbbalakítása volt, különböző fluortartalmú aminok felhasználásával, redukatív aminálás körülményei között.



Kulcsszavak: aminosav, piperidin, gyűrűzárás, redukatív aminálás, fluor

Irodalom

- [1] Kiss, L.; Fülöp, F. *The Chem. Rec.* **2018**, 266-281.
[2] Ábrahám, R. A.; Kiss, L.; Fustero, S.; Fülöp, F. *Synthesis* **2017**, 49, 1206–1213.

Glioximokkal képzett új Fe(II)-komplexek szintézise, és a ligandumok hatása a fizikai-kémiai tulajdonságokra

Syntheses of Novel Fe(II)-glyoxime Complexes, and Influence of Ligands on Physical-Chemical Properties

ifj. Dr. VÁRHELYI Csaba¹, Dr. KUZMANN Ernő², Dr. SZALAY Roland²,
Dr. POKOL György³, Dr. MIHÁLY Judith⁴, Dr. SZABÓ Pál⁴, Dr. GOGA Firuța¹,
GOLBAN Ligia-Mirabela¹, Dr. HUSZTHY Péter³, VÁRHELYI Melinda¹

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia Kar, Kolozsvár, Arany János u. 11,
vcaba@chem.ubbcluj.ro, firutagoga@yahoo.com, ligiamirabela@yahoo.com,
varhelyimelinda@gmail.com, www.chem.ubbcluj.ro

²Eötvös Lóránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, 1117-Budapest, Pázmány P. s. 1/A,
kuzmann@caesar.elte.hu, szalayr@caesar.elte.hu, www.chem.elte.hu

³Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szt. Gellért tér 4, pokol@mail.bme.hu, huszthy@mail.bme.hu, www.ch.bme.hu

⁴MTA-Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest,
Magyar tudósok körútja 2, mihaly.judith@ttk.mta.hu, www.ttk.mta.hu

ABSTRACT

In our research two types of iron(II)-complexes were synthesized with glyoximes: $[\text{Fe}(\text{Glyox.H})_2(\text{amine})_2]$ and $[\text{Fe}(\text{Glyox.})_3(\text{BOR})_2]$. The prepared complexes of the first type: $[\text{Fe}(\text{Diethyl-Glyox.H})_2(\text{imidazole})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Ethyl-Propyl-Glyox.H})_2(\text{imidazole})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Ethyl-Propyl-Glyox.H})_2(2\text{-aminopyrimidine})_2]$, and the second: $[\text{Fe}(\text{Diethyl-Glyox.})_3(\text{BOH})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Diethyl-Glyox.})_3(\text{BOEt})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Ethyl-Propyl-Glyox.})_3(\text{BOH})_2]$ and $[\text{Fe}(\text{Ethyl-Propyl-Glyox.})_3(\text{BOMe})_2]$. The synthesis was made in inert atmosphere in suitable solvent, in presence of reducing agent. The used metal salt was FeSO_4 .

After presenting the possible applications of these compounds, we report the study of their thermoanalytical behaviour (TG, DTA, DTG), spectroscopic features (such as Mössbauer, FTIR, NMR, UV-VIS spectroscopy, mass spectrometry) as well as their powder XRD. We also study the influence of nature and chain length of ligands for the Fe–N bonds characteristics.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk során két típusú, glioximokkal képzett vas(II)-komplext állítottunk elő: $[\text{Fe}(\text{Gliox.H})_2(\text{amin})_2]$ és $[\text{Fe}(\text{Gliox.})_3(\text{BOR})_2]$. Az első típus előállított vegyületei: $[\text{Fe}(\text{Dietil-Gliox.H})_2(\text{imidazol})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Etil-Propil-Gliox.H})_2(\text{imidazol})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Etil-Propil-Gliox.H})_2(2\text{-amino-pirimidin})_2]$, a másodiké: $[\text{Fe}(\text{Dietil-Gliox.})_3(\text{BOH})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Dietil-Gliox.})_3(\text{BOEt})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Etil-Propil-Gliox.})_3(\text{BOH})_2]$ és $[\text{Fe}(\text{Etil-Propil-Gliox.})_3(\text{BOMe})_2]$. A szintézist inert atmoszférában végeztük a megfelelő oldószerben, redukálószer jelenlétében. A használt fém só FeSO_4 volt.

A felhasználási lehetőségek bemutatása után tárgyaljuk komplexeink kémiai sajátosságait, szerkezetét, Mössbauer, FTIR, NMR, UV-VIS spektroszkópiát, valamint termoanalitikai (TG, DTA, DTG), tömegspektrometriai és por-röntgen diffrakciós (XRD) módszerekkel. Tanulmányoztuk a ligandumok természetének és lánchosszúságának a hatását a Fe–N kötések jellemzőire.

Kulcsszavak: α -glioximok, azometinek, Fe(II)-komplexek, spektroszkópiai vizsgálatok, hőbontás

Köszönetnyilvánítás

A szerzők közül ifj. Várhelyi Csaba köszöni a „Domus Hungarica” alapítványnak, hogy a számára megítélt évi egy hónapos ösztöndíjjakkal lehetővé tette a jelen dolgozat létrejöttét.

1,4-Benzokinon reakciói heterogén fotokatalitikus rendszerekben

Reactions of 1,4-benzoquinone in Heterogeneous photocatalytic Systems

FÓNAGY Orsolya¹, SZABÓNÉ Dr. BÁRDOS Erzsébet¹,
Dr. HORVÁTH Ottó¹, Dr. KISS Gyula²

¹ Pannon Egyetem, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék
8200 Veszprém, Egyetem utca 10., fonagy@almos.uni-pannon.hu

² Pannon Egyetem, Föld- és Környezettudományi Tanszék

ABSTRACT

1,4-benzoquinone and its derivatives play electron-relaying roles in numerous living organisms. According to the literature, in heterogeneous photocatalytic studies, 1,4-benzoquinone is commonly used as a superoxide radical anion scavenger competing with the model compounds to be degraded. Although this method could provide some information about the role of $O_2^{\cdot-}$ in the degradation process, its quantity and formation rate cannot be determined. In our work, the applicability of 1,4-benzoquinone as a direct radical scavenger was studied under various circumstances.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az 1,4-benzokinon és származékai redoximediátor szerepet töltenek be számos élő szervezetben. Heterogén fotokémiai vizsgálatok során gyakran alkalmazzák az 1,4-benzokinont versengő szuperoxid-gyökanion befogóként a lebontandó komponens mellett. A kísérlet eredménye ugyan információt ad a gyökanion bomlási folyamatban betöltött szerepéről, de nem határozható meg a mennyisége és képződési sebessége. Munkánk során különböző kísérleti körülmények között vizsgáltuk az 1,4-benzokinon közvetlen gyökbefogóként történő alkalmazhatóságát.

Kulcsszavak: heterogén fotokatalízis, TiO_2 , 1,4-benzokinon, szuperoxid-gyökanion, 1,4-hidrokinon

A kutatás anyagi háttérét a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 és az EFOP-3.6.1-16-2016-00015 pályázatok biztosították. Fónagy Orsolya munkáját a magyar Emberi Erőforrások Minisztériuma által az Új Nemzeti Kiválóság Program keretében meghirdetett Felsőoktatási Doktorjelölti Kutatói Ösztöndíj támogatta.

Nanoméretű TiO₂ előállítása természetes rutil őrlésével

The Production of Nanoscale TiO₂ by Nanogrinding of Natural Rutile

ALMÁSI Enikő Eszter¹, RÁCZ Ádám², PAP Zsolt^{1,3},
BOHÁCS Katalin², GREGUS Éva², HALYAG Nóra²

¹ Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet,
Tisza Lajos krt. 130, Szeged, HU-6720

² Miskolci Egyetem, Miskolci Egyetem,

Nyersanyagelőkészítési és Környezeti Eljárástechnikai Intézet, Miskolc-Egyetemváros, HU-3515

³ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Nanustrukturált Anyagok és Bio-Nano Felületek Központja,
Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Kutatóintézete,
Treboniu Laurian utca 42, Kolozsvár, RO-400271

ABSTRACT

Titanium dioxide (TiO₂) shows good physical and chemical properties, that is why TiO₂ is a suitable semiconductor for photocatalytic water treatment. TiO₂ is present in three crystalline structures which can be found also in nature: brookite, the metastable anatase, and the thermodynamically (600-1885 °C) stable rutile. Sparse information is available concerning the potential environmental application of natural titania. Therefore, the aim of this research was the application of natural rutile minerals for photocatalytic water treatment replacing commercial TiO₂. The first steps of the research were the grinding of natural rutile down to nanoscale particles. After 30 minutes nanogrinding the desired primary crystal size of rutile minerals has been achieved: 20-30 nm, and all the size fractions were characterized using SEM, DRS and XRD

Keywords: Rutile, TiO₂, nanomaterials, photocatalysis, nanogrinding

ÖSSZEFOGLALÓ

A titán dioxid (TiO₂) a fotokatalitikus víztisztítás központjában áll, előnyös fizikai és kémiai tulajdonságai miatt. A természetben a TiO₂ három ásvány formájában van jelen: brookit, metastabil anatóz és termodinamikailag (600-1885 °C) stabil, rutil. A nanoméretű anyagok környezetre gyakorolt hatásáról még nagyon keveset tudunk. Kutatásunk célja a természetben előforduló rutil ásványok felhasználása fotokatalitikus célokra. A kutatás első lépése az ásványok kristálméretének csökkentése, nanométeres tartományba. Már 30 perces őrlés után jelentősen csökkent az ásványok mérete, míg 300 perc után az ásványok elsődleges szemcsemérete 20-30 nm között volt. A kapott őrlési frakciókat jellemeztük XRD, DRS és SEM módszerek segítségével.

Kulcsszavak: rutil, TiO₂, nanoanyag, fotokatalízis, nanoőrlés

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a „Fenntartható Nyersanyag-gazdálkodási Tematikus Hálózat – RING 2017” című EFOP-3.6.2-16-2017-00010 azonosító számú project keretében, az Európai Szociális alap és Magyarország Kormányának társfinanszírozásával valósul meg.

A Hansen oldódási paraméterek összehasonlítása metanol és víz-etanol elegyekre

Comparison of the Values of Hansen Solubility Parameters for Methanol and Water-ethanol Mixtures

drd. ing. ANDRÁS Csaba Dezső¹, Dr. ing. MOLNOS Éva¹, Dr. MÁTYÁS László²

¹Sapientia EMTE, Élelmiszertudományi Tsz., Csíkszereda, Szabadság tér 1.
Románia, andrascaba@uni.sapientia.ro, <http://csik.sapientia.ro>

²Sapientia EMTE, Biomérnöki Tsz., 530104 Csíkszereda, Szabadság tér 1. Románia

ABSTRACT

Knowing the value of the Hansen solubility parameters of solvents provides important information for solvent choosing and optimization of solid-liquid extraction processes. Using of green solvents in industry has a great environmental importance, although in food industry the requirements are even higher, there one has to use only GRAS (Generally Regarded as Safe) solvents. For extraction of polar bioactive substances from biomass, the most commonly used solvents are aliphatic alcohols. Due to low molecular weight, the methanol has a low boiling point and low viscosity, therefore it has to be an ideal solvent in many cases, but due to its toxicity the utilization in food industry is prohibited. However, ethanol (GRAS solvent) has slightly different properties that influence their extraction power, in comparison with methanol, its polarity is smaller and the molecular weight is greater. Obviously, the water is considered the "greenest" solvent, beside it is highly polar and possess unlimited miscibility with ethanol, therefore we selected it as polar modifier co-solvent. In our work, we compared the values of Hansen parameters of methanol and water-ethanol solutions in order to find the best GRAS replacer of methanol in food industrial applications. For extraction of polar compounds, the significance of the dispersive Hansen parameter of the solvent (which related to the strength of the van der Waals interaction) is negligible, therefore our aim was to find the optimal composition (domain) of ethanol-water solutions having the closest polar and hydrogen bond Hansen parameters in comparison with methanol.

Keywords: Hansen solubility parameter, polar modifier co-solvents, GRAS solvents, solid-liquid extraction

ÖSSZEFOGLALÓ

Az oldószerek Hansen oldódási paramétereinek ismerete fontos információkat nyújt a szilárd-folyadék extrakció oldószereinek kiválasztásához és a folyamat optimalizálásához. Az ipar számára fontosak a „zöld oldószerek”, az élelmiszeripar számára pedig a még szigorúbb követelményeknek megfelelő GRAS oldószerek. A poláros bioaktív anyagok biomasszából történő kinyerése esetén a leggyakrabban alkalmazott oldószerek az alifás alkoholok. A metanol kis molekulatömege következtében forráspontja és viszkozitása is alacsony és sok esetben ideális oldószer lenne, de toxicitása miatt az élelmiszeriparban nem alkalmazható. Az etanol viszont GRAS oldószernek minősül, de fizikai tulajdonságai kissé különböznek, melyek befolyásolják az oldóképességét: a metanoléhoz viszonyított polaritása kisebb, molekulatömege pedig nagyobb. A víz a „legzöldebb” oldószer, polaritása magas és az etanollal korlátlanul elegyedik, ezért poláris módosító segédoldószernek választottuk. Dolgozatunkban a Hansen paraméterek összehasonlításával azt vizsgáljuk, hogy milyen mértékben helyettesíthető élelmiszeripari alkalmazásokban a metanol etanol-víz oldatokkal. A poláros komponensek extrakciója esetén az oldószer Hansen paraméterének diszperziós tagja (amely a van der Waals interakciók erősségét jelenti) elhanyagolható, ezért az volt a célunk, hogy az etanol-víz elegy poláros és hidrogén-híd interakciókat jellemző Hansen paramétereit közelítsük a metanol ugyanezen paramétereire.

Kulcsszavak: Hansen oldódási paraméterek, poláros módosító segédoldószerek, GRAS oldószerek, szilárd-folyadék extrakció

Anyagcseremérnökségben alkalmazható dehidrogenáz enzimek vizsgálata

Studies of Dehydrogenases Applicable in Metabolic Engineering

ANTAL Emőke^{1*}, BALÁZS Márta¹, SINKLER Réka¹,
Dr. BODOR Zsolt^{1,2}, Dr. MIKLÓSSY Ildikó^{1,2}

1 Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Kémia Doktori Iskola, 7624 Pécs,
Ifjúság útja 6., Tel.: +36-72-503-600, <http://www.ttk.pte.hu>

2 Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Csíkszeredai Kar, Biomérnöki Tanszék, 53104
Csíkszereda, Szabadság tér 1., Tel.: +40 266 317 121, Fax: +40 266 372 099, csik.sapientia.ro

ABSTRACT

Our study concerns characterization of alcohol/aldehyde dehydrogenases from *Clostridium acetobutylicum* and *Chloroflexus aurantiacus*, with possible application in designing new biosynthetic pathways for industrially relevant chemicals. The proteins were expressed in *E. coli* BL21 (DE3) Star purified using affinity chromatography, and the enzymatic properties were studied on different substrates by spectrophotometry. *In silico* studies of the enzymes were performed by using various online platforms and software designed for enzyme modelling and identification of specific regions, like NCBI (identification of similar enzyme sequences), ExPASy (determination of enzyme properties), Modeller (models construction), UCFS Chimera (examination and joining of the modelled domains), SwissDock and Autodock software. The amino acids responsible for the binding and modification of the substrates were identified and compared with the *in vitro* results.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk során a *Clostridium acetobutylicum* és *Chloroflexus aurantiacus* baktériumokból származó alkohol/aldehid-dehidrogenázok jellemzését valósítottuk meg, jelentős vegyipari kiindulóanyagok új bioszintetikus útvonalainak kialakítása céljából. A rekombináns fehérjéket *E. coli* BL21 (DE3) Star gazdasejtben termeltettük heterológ rendszerben, affinitáskromatográfiával tisztítottuk, és a tisztított fehérjék enzimatiszt tulajdonságait különböző szubsztrátokon spektrofotometriás módszerrel vizsgáltuk. Az enzimek *in silico* vizsgálatait különböző online platformok és szoftverek felhasználásával végeztük el, mint például az NCBI (hasonló enzimek azonosítása), ExPASy (enzim tulajdonságok meghatározása), Modeller (modellkészítés), UCFS Chimera (modellezett domének vizsgálata és összekapcsolása), SwissDock és Autodock. Sikeresen azonosítottuk azokat az aminosavakat, amelyek felelősek a szubsztrátok megkötéséért és módosításáért, és az *in vitro* eredményekkel hasonlítottuk össze.

Kulcsszavak: dehidrogenáz enzimek, bioszintetikus útvonal, heterológ expresszió, *in silico* modellezés

Köszönetnyilvánítás: kutatási munkánkat a Sapientia EMTE 2017/2018-as Egyetemi Kutatási Program keretében megvalósított 227/2/17.05.2017 számú kutatási projekt támogatta.

***A Basfia succiniciproducens* bioszintetikus potenciáljának tanulmányozása**

Studies on the bioSynthetic Potential of *Basfia Succiniciproducens*

BALÁZS Márta^{1*}, BARTOS Hunor¹, ANTAL Emőke¹,
Dr. MIKLÓSSY Ildikó^{1,2}, Dr. BODOR Zsolt^{1,2}

1 Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Kémia Doktori Iskola,
7624 Pécs, Ifjúság útja 6., Tel.: +36-72-503-600, <http://www.ttk.pte.hu>

2 Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Csíkszeredai Kar, Biomérnöki Tanszék, 53104
Csíkszereda, Szabadság tér 1., Tel.: +40 266 317 121, Fax: +40 266 372 099, csik.sapientia.ro

ABSTRACT

Recently, we observe a real need for development of biosynthetic processes for the production of various platform chemicals, thus for the development of biotechnologies for new bacterial strains as well. The natural succinic acid producer *Basfia succiniciproducens* is a recently isolated bacterial strain with high industrial potential, for which genetic engineering methods are limited. Results of the present work can contribute to development of these methods. During our research, broad host-range RSF1010 and RK2 origin-containing plasmid vectors, suitable for cloning and expression of heterologous proteins in this strain were selected, and verified by digestion with restrictases. In the following steps of the experiments, transformation of these vectors into *Basfia succiniciproducens* 22022 strain and study of control gene (EGFP) expression was carried out.

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjainkban valós piaci igény van több vegyipari platform-molekula bioszintetikus termelésének kidolgozására, ennek megfelelően új, eddig kevésbé tanulmányozott baktériumtörzsek biotechnológiájának kidolgozására is. A *Basfia succiniciproducens* természetes szukcinsav-termelő, jó ipari potenciállal rendelkező törzs, amelynek biotechnológiájának kidolgozásához járul hozzá jelen kutatási munka. A törzsben működő, klónozó és rekombináns fehérjék expressziójára alkalmas plazmidok kidolgozásához széles gazdaspektrumú RSF1010 replikációs origót, illetve az RK2 replikációs origót hordozó plazmidokat választottunk ki, izoláltuk és restriktációs emésztéssel ellenőriztük. A kutatási munka folytatásában a plazmidok *Basfia succiniciproducens* 22022 törzsbe való transzformálását és kontroll génnek (EGFP) expressziójának vizsgálatát végeztük el.

Kulcsszavak: *Basfia succiniciproducens*, bioszintézis, géntechnológia, plazmid vektor

Köszönetnyilvánítás: kutatási munkánkat a Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem 2017/2018-as Egyetemi Kutatási Program keretében megvalósított 227/2/17.05.2017 számú projekt támogatta.

Silóból származó antagonistá baktériumok által termelt antimikrobiális vegyületek

Antifungal Compounds in Case of Antagonistic Silage Bacteria

BECZE Annamária^{1,2}, VINCZE Éva Boglárka^{1,2},
Dr. ALBERT Csilla³, Dr. MARA Gyöngyvér¹

¹Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Csíkszeredai Kar, Biomérnöki Tanszék, Csíkszereda, Hargita megye, 530104, Szabadság tér, 1 szám, Tel.: 40-266-314-657, e-mail: maragyongyver@csik.sapientia.ro, <http://ghhk.csik.sapientia.ro/hu>

²Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Kémia Doktori Iskola, 7624 Pécs Ifjúság útja, 6 szám, Tel.: 36-72-536-273

³Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Csíkszeredai Kar, Élelmiszertudományi Tanszék, Csíkszereda, Hargita megye, 530104, Szabadság tér, 1 szám, Tel.: 40-266-314-657

ABSTRACT

The biocontrol bacteria can suppress or prevent the damages and losses caused by phytopathogens. Mechanisms responsible for antagonistic activity include inhibition of the pathogen by different antibiotics and lipopeptides, cell wall degrading enzyme production, competition for minerals, nutrients, and colonization sites. The aim of our research was the selection of biocontrol bacterial strains isolated from corn, alfalfa, and grass silage and the quantification of antifungal compounds. The bacterial culture filtrate was screened for antifungal lipopeptides as iturin and fengycin using HPLC method. Our results showed that the studied bacterial strains are good candidates as biocontrol strains based on antifungal compound production capacity.

Keywords: antagonism, iturin, fengycin, biocontrol, HPLC method

ÖSSZEFOGLALÓ

A biokontroll baktériumok elnyomják vagy megakadályozzák a fitopatogének által okozott károkat és veszteségeket. Az antagonistá aktivitásért felelős mechanizmusok közé tartozik a kórokozó gátlása különböző antibiotikumokkal és lipopeptidekkel, a sejtfalat lebontó enzimek termelése, ásványi anyag, tápanyag és kolonizációs helyért való versengés. Kutatásunk célja a kukoricából, lucernából és szenázsból izolált biokontroll baktérium törzsek szelektálása és az antimikrobiális vegyületek mennyiségi meghatározása. A baktériumok által termelt lipopeptidek, mint az iturin, fengicin mennyiségét határoztuk meg HPLC módszerrel. Eredményeink alapján elmondhatjuk, hogy a vizsgált baktériumtörzsek jó biokontroll potenciállal rendelkeznek az antimikrobiális vegyületek termelésének köszönhetően.

Kulcsszavak: antagonizmus, iturin, fengicin, biokontroll, HPLC módszer

The research was supported by the Romanian Ministry of Education, Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding, PNCDI II, project no. 159/2014, acronym CERES.

MDA gyártás előállítási lépéseinek tanulmányozása laboratóriumi körülmények között

Studying the Reaction Steps of MDA Production under Laboratory Conditions

BOROS Renáta Zsanett^{1,2}, TOBOZ Lilla³, HARNÓCZ Lilla¹, BERECH Sándorné,
STOMP Dávid¹, VARGA István¹, FARKAS László¹

¹ BorsodChem Zrt, Kazincbarcika, Bolyai tér 1., H-3700 Kazincbarcika, Hungary
Telefon: +36-48 511 211, Fax: +36-48 511 511, www.borsodchem-group.com

² Miskolci Egyetem, Műszaki Anyagtudományi Kar, Kémiai Intézet
3515 Miskolc-Egyetemváros

³ Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar,
Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1

ABSTRACT

Methylene diphenyl diisocyanate (MDI) is one of the most important raw material of polyurethanes. MDI is synthesized via the phosgenation of methylene diphenyl diamine (MDA). The focus of this study is the examination of MDA synthesis reacting aniline with formaline in the presence of hydrochloric-acid catalyst. The amount of the formed by-products and the change of ring-distribution was studied during the reaction run.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az poliuretánok egyik legfontosabb alapanyaga a metilén difenil diizocianát (MDI), amelyet ipari körülmények között metilén difenil diamin (MDA) foszgenezésével állítanak elő. Az alábbi tanulmányban az MDA előállítását vizsgáltuk formalin és anilin reakciójával sósav katalizátor jelenlétében. Tanulmányoztuk a képződött melléktermékek mennyiségének változását a reakció előrehaladásával, valamint a gyűrűeloszlás módosulását.

Kulcsszavak: MDA, kondenzáció, átrendeződés, melléktermékek, reakciómechanizmus

Köszönetnyilvánítás: Az alábbi tanulmány a GINOP-2.3.4-15-2016-00004 pályázat keretén belül valósult meg.

Membráncellás klórgyártás vegyszeripari maradékainak környezetbarát semlegesítése, anyagában történő újrahasznosítása

Eco-friendly Neutralization of Chemical Industrial Residues of Membrane Cell Chlorine Production and Waste Recycling

BÓDAY Ádám², DARABOS Viktor², FARKAS László⁵, JAKAB-NÁCSEA Alexandra⁵,
Dr. KAPTAY György³, MOGYORÓSI András⁴, STOMP Dávid⁵, SZABÓ Dávid³,
Dr. SZŐRI Milán¹, Dr. VISKOLCZ Béla¹

¹Miskolci Egyetem, Műszaki Anyagtudományi Kar, Kémiai Intézet, H-3515 Miskolc- Egyetemváros

²Magyar Fejlesztési Intézet, H-1032 Budapest, Kiscelli utca 7-9.

³Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közhasznú Nonprofit Kft., H-3519 Miskolc Iglói út 2.

⁴Vegyipari Gépgyártó és Szolgáltató Kft., H-3792 Sajóbábony, Gyártelep hrsz.: 024/13

⁵BorsodChem Zrt. , H-3700 Kazincbarcika, Bolyai tér 1.

ABSTRACT

In accordance with eco-conscious aspect of Wanhua-BorsodChem Ltd in year 2018 the mercury cell chlorine production was shut down and at the same time a subsequent high capacity membrane cell chlorine plant was started to operate at Kazincbarcika site. Our research project on decreasing of chlorate-ions formed during the electrolysis and treatment of chemical residues are integral parts of the new membrane cell technology development which brief summary is introduced in the following poster. The research is supported by European Union within the framework of GINOP-2.2.1-15-2016-00005 project.

ÖSSZEFOGLALÓ

A Wanhua Borsodchem Zrt. környezettudatos szemléletmódjával összhangban a 2018-as év során sor került a higanykatódos eljárással történő klórgyártás leállítására, s ezzel egyidejűleg egy újabb nagy kapacitással bíró membráncellás klórüzem elindítására a kazincbarcikai telephelyen. Az új membráncellás technológia fejlesztésének részét képezi az elektrolízis során keletkező klorát-ionok csökkentésére és vegyszeripari maradékok kezelésére irányuló kutatási projekt, melynek rövid összefoglalása az alábbi poszteren kerül bemutatásra. A kutatás a GINOP-2.2.1-15-2016-00005 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával valósult meg.

Kulcsszavak: nátrium-klorát, vegyszeripari maradék, katalitikus bontás, membráncellás elektrolízis, katalitikus hidrogénezés

Difluoroboránok szintézise és szerkezetvizsgálata

Synthesis and Structural Characterization of Difluoroboron Complexes

BRÉM Balázs, GÁL Emese, GĂINĂ Luiza-Ioana, CRISTEA Castelia

Babeş-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering,
Arany János str. 11, Cluj-Napoca, Romania, e-mail: bbrem@chem.ubbcluj.com

ABSTRACT

Boron-containing materials often show impressive optical properties. Difluoroboron β -diketonate complexes, as a special type of them, are classic fluorescent molecules with excellent photophysical properties, such as large molar extinction coefficients, high quantum yields, intense emission, outstanding photostability [1]. The literature reports disclose that the photoluminescence properties of such complexes depend strongly on the structures of the β -diketonate ligands whether the fluorogens are in solution or in the solid state [2]. In the present study 10-alkyl-phenothiazine was selected as the donor group, because electron-rich phenothiazines possess two important aspects that make it an ideal building block for photoluminescence and electroluminescence molecular materials: strong electron donor due to its low oxidation potential [3] and the non-planar heteroaromatic ring structure restricts π -stacking aggregation, which may lead generally to a detrimental quenching of the luminescence in the solid state [4]. Finally, 10-alkyl-phenothiazine-containing unsaturated β -diketones and their BF_2 -complexes have been synthesized and characterized.

ÖSSZEFOGLALÓ

A bór tartalmú anyagok kiváló optikai tulajdonságokkal rendelkeznek, ezek különleges típusa a difluoroborán β -diketonát komplexek, melyek klasszikus fluoreszcens molekulák, kiváló fotofizikai tulajdonságokkal rendelkeznek: nagy moláris extinció, nagy kvantumhatásfok, intenzív emisszió, kiemelkedő fotostabilitás [1]. A szakirodalom alapján az ilyen komplexek fotolumineszcens tulajdonságai erősen függenek a β -diketonát ligandumok szerkezetétől, függetlenül attól, hogy a fluorogének oldatban vagy szilárd állapotban vannak [2]. Jelen tanulmányban donor csoportnak a 10-alkil-fenotiazint választottuk, mivel az elektronban gazdag fenotiazinok két fontos tulajdonsággal rendelkeznek, amelyek ideális fotolumineszcens és elektrolumineszcens molekulákká teszik: erős elektrondonor molekula mivel alacsony az oxidációs potenciálja [3] és a nemplanáris heteroaromás gyűrű szerkezete korlátozza a π -stacking aggregációt, ami általában a szilárd állapotban levő lumineszcencia káros hatásának kiküszöböléséhez vezet [4]. Kutatómunkánk célja a 10-alkil-fenotiazin tartalmú telítetlen β -diketonok és BF_2 -komplexeinek előállítása és szerkezetvizsgálata volt.

Kulcsszavak: β -diketonát, ligandum szerkezet, donor csoport, fluoreszcens molekula.

- [1] M. Liu, L. Zhai, J. Sun, P. Xue, P. Gong, Z. Zhang, J. Sun, R. Lu, *Dyes. pigm.*, **2016**, 128, 271-278.
- [2] Y. Mizuno, Y. Yisilamu, T. Yamaguchi, M. Tomura, T. Funaki, H. Sugihara, K. Ono, *Chem. Eur. J.*, **2014**, 20, 13286-13295.
- [3] S. Nath, H. Pal, D. K. Palit, A. V. Sapre, J. P. Mittal, *J. Phys. Chem. A*, **1998**, 102, 5822-5830.
- [4] G. W. Kim, M. J. Cho, Y. J. Yu, D. H. Cho, *Chem. Mater.*, **2007**, 19, 42-50.

Vízoldható ruténium-nanorészecskék előállítása és alkalmazása arének vizes-szerves kétfázisú hidrogénezési reakciójában

Synthesis of Water-soluble Ruthenium Nanoparticles (Ru-NPs) and their Application in the Aqueous Biphasic Hydrogenation of Arenes

CSÁSZÁR Zsófia¹, Dr. GULYÁS Henrik², Dr. BAKOS József¹, Dr. FARKAS Gergely¹

¹Szerves Kémia Intézeti Tanszék, Pannon Egyetem,
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

²Department de Química Física i Inorgànica, Univ. Rovira i Virgili,
C/Marcel·lí Domingo s/n, 43007 Tarragona, Spain

Tel.: +36 88 624 718, fax: +36 88 624 469,

e-mail: csaszsofi@almos.uni-pannon.hu, honlap: www.uni-pannon.hu

ABSTRACT

The catalytic hydrogenation of aromatic hydrocarbons is one of the most important processes in modern petrochemistry and in organic syntheses as well. However, the easily recyclable heterogeneous catalysts commonly used in these processes are not always characterized by high activity and selectivity. In this context, it is of particular interest to develop novel catalysts combining the advantageous properties of both homogeneous (high activity and selectivity) and heterogeneous (stability and recyclability) catalytic systems for such transformations. The application of water-soluble metal nanoparticles (NPs) in a biphasic aqueous-organic system offers an ideal solution for the above difficulties.

Here we report the stabilization of new water-soluble RuNPs by sulfonated triaryl phosphines. These ligands were selected because of their high structural modularity and easy preparation. We also present the synthesis of the new ligands as well as the influence of their structure on their catalytic activity in the aqueous biphasic hydrogenation of aromatic hydrocarbons.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az aromás szénhidrogének katalitikus hidrogénezése a finom- és petrokémiai szintézisek egyik kiemelt fontosságú folyamata. A reakcióban általánosságban alkalmazott heterogén katalizátorokat enyhébb körülmények között gyakran kis aktivitás és szelektivitás jellemzi. Mindezek alapján, a heterogén katalizátorok (nagy stabilitás és visszaforgathatóság) és homogén fémkomplexek (nagy aktivitás és szelektivitás) előnyös tulajdonságait ötvöző katalizátor-rendszerek kidolgozása óriási jelentőséggel bír. A vízoldható átmenetifém-nanorészecskék katalitikus alkalmazása egy ígéretes megoldást kínál arének vizes-szerves kétfázisú hidrogénezésének hatékony megvalósítására.

Munkánk során új vízoldható Ru-nanorészecskéket állítottunk elő szulfonált triaril-foszfínok segítségével. A ligandumok egyszerűen előállíthatók és moduláris szerkezettel rendelkeznek. Az új katalizátorokat aromás szénhidrogének vizes-szerves kétfázisú hidrogénezési reakcióiban tanulmányoztuk.

Kulcsszavak: ruténium-nanorészecskék, szulfonált foszfínok, vizes-szerves kétfázisú szintézis

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00053, valamint az NKFIH K 115539 és K 128074 azonosító számú projektek keretében valósult meg.

HPLC metodikafejlesztés a triptofán és metabolitjainak mérésére

HPLC Method Development for the Assessment of Tryptophan and its Metabolites

CSEH Edina Katalin¹, Dr. VERES Gábor^{1, 2}, Prof.
Dr. VÉCSEI László^{1, 2}, Dr. ZÁDORI Dénes¹

¹Department of Neurology, University of Szeged, Semmelweis str. 6., 6725 Szeged, Hungary,
<http://www.klinikaikozpont.u-szeged.hu/neur/en/>

²MTA-SZTE Neuroscience Research Group, Szeged, Hungary
cseh.edina@med.u-szeged.hu

ABSTRACT

As tryptophan and its metabolites are of great interest in certain disorders, several methods with different chemical and physical aspects have been described for the simultaneous assessment of multiple metabolites.

Here, we describe a reverse-phase high performance liquid chromatography method optimization by testing different pH values, organic and water phase ratios and column types for the separation of tryptophan, kynurenine, kynurenic acid, serotonin, anthranilic acid and the two internal standards used for the two different detectors (UV and fluorescence). Moreover, due to the effect of the zinc-acetate (ZnAc) concentration on the measurement of kynurenic acid as a derivatization agent, five ZnAc concentrations in the mobile phase were tested to see how it influences the sensitivity of the compound.

Finally, the optimized method is tested on biological samples, to see whether it is suitable or not.

ÖSSZEFOGLALÓ

Számos megbetegedésben egyre nagyobb érdeklődés övezi a triptofánt és metabolitjait, így különböző kémiai és fizikai paraméterekkel jellemezhető módszereket is leírtak az egyes metabolitok mérésére.

Jelen tanulmány célja egy fordított fázisú nagy hatékonyságú folyadékkromatográfiás módszer optimalizálása, különböző pH, szerves és vizes fázis arány, valamint oszlop típus tesztelésével, amelyek a triptofán, kinurenin, kinurénsav, antranilsav, szerotonin és a két különböző detektoron (UV és fluoreszcens) alkalmazott belső standardok elválasztására szolgál. Továbbá, mivel a mobilfázisban megjelenő cink-acetát derivatizációs ágensként hat a kinurénsavra, megvizsgáltuk, hogy különböző koncentrációiban hogyan befolyásolja a komponens érzékenységet.

Végül, megvizsgáltuk az optimalizált módszer alkalmazhatóságát biológiai minták mérésével.

Kulcsszavak: triptofán metabolitok, elválasztási technika, HPLC.

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a GINOP-2.3.2-15-2016-00034 („Neurodegeneratív immunológiai kórképek molekuláris biológiai alapjai: terápiás kísérletek kinureninekkel”) és az EFOP-3.6.1-16-2016-00008 („Intelligens élettudományi technológiák, módszertanok, alkalmazások fejlesztése és innovatív folyamatok, szolgáltatások kialakítása a szegedi tudásbázisra építve”) pályázatok támogatás. Dr. Zádori Dénes a Magyar Tudományos Akadémia Bolyai János Kutatási Ösztöndíjának támogatásában részesül.

Kelát- és hídképző N-heterociklusos karbén ligandumok átmenetifém komplexeinek előállítása és szerkezetvizsgálata

Synthesis and Structural Investigation of Transition Metal Complexes Using Chelating and Bridging N-heterocyclic Carbene Ligand Precursors

Dr. CZÉGÉNI Csilla Enikő¹, Dr. UDVARDY Antal², DE Sourav², Dr. KATHÓ Ágnes²,
Prof. Dr. JOÓ Ferenc^{1,2}

¹MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

²Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1. tel.: (36)-52-512900/22588,
e-mail: nagy.csilla@science.unideb.hu, web: fizkem.unideb.hu

ABSTRACT

The majority of reported N-heterocyclic carbene (NHC) ligands are monodentate [1] and fewer complexes are known with bidentate di-N-heterocyclic ligands [2],[3]. For a long time our research group studied stable nucleophilic carbene complexes like N-heterocyclic carbenes. A bridge-functionalized Rh(I)-di-NHC-dinuclear complex was prepared by reacting the corresponding bis-imidazolium salt with [Rh(COD)Cl₂]₂ in presence of potassium carbonate as a highly efficient mild base. The chelating Rh(I)-complexes were obtained by transmetallation reaction from the silver-NHC-complex. All complexes were characterized by spectroscopy and the bridging Rh(I)-carbene-complex by single crystal X-ray analysis.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az irodalomban közölt N-heterociklusos karbén (NHC) ligandumok többsége egyfogú ligandum [1] és csak kevesebb kétfogú di-N-heterociklusos ligandum ismert [2],[3]. Kutatócsoportunkban már régóta foglalkozunk stabil N-heterociklusos karbén-komplexek vizsgálatával. A kétmagvú Rh(I)-di-NHC-komplexet a megfelelő bisz-imidazólium só, [Rh(COD)Cl₂]₂ és kálium-karbonát jelenlétében állítottuk elő. A Rh(I)-di-NHC-kelát-komplexet ezüst-NHC-karbén komplexen keresztül történő transzmetallálással nyertük. A komplexek szerkezetét spektroszkópiásan jellemeztük, valamint a kétmagvú Rh(I)-karbén-komplex szerkezetét egykristály röntgendiffrakciós mérés is alátámasztja.

Kulcsszavak: di-NHC-komplexek, kelát-NHC-komplex, ródium

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 és a GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alap támogatását (NKFI-1 PD115535, NKFI-FK128333).

Hivatkozások:

- [1] K. Öfele, *J. Organomet. Chem.* **1968**, *12*, 42.
- [2] S. Burling, L.D. Field, H.L. Li, B.A. Messerle, P. Turner, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2003**, 3179
- [3] Y.A. Wanniarachchi, M.A. Khan, L.M. Slaughter, *Organometallics*, **2004**, *23*, 5881

Mesterséges és természetes hidroxiapatit adalékokból előállított bioüvegkerámiák vizsgálata

Synthesis and Characterization of Bioactive Glass-ceramics Containing Synthetic and Biological Hydroxiapatite

ENISZNÉ Dr. BÓDOGH Margit¹, CZÉDLI Diána¹

¹Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Anyagmérnöki Intézet,
H-8201 Veszprém, Egyetem u. 10. Pf. 158, Tel.: +36-88/624-266, www.anyagmernok.hu

ABSTRACT

Biomaterials are used to replace or treat certain parts of the human body. Replacement of human bone tissue can be solved with Ca-phosphates that dissolve in body fluids to allow formation of bone on their surface. The aim of my experiments was to produce and investigate bioactive glass ceramic, which includes pre-treated animal bone or hydroxyapatite produced by precipitation method.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az emberi test egyes részeinek, bizonyos funkcióinak helyettesítésére, illetve kezelésére különböző bioanyagok szolgálnak. Az emberi csontszövetek pótlását Ca-foszfátokkal tudják megoldani, melyek a testnedvekben feloldódva lehetővé teszik a felületükön a közvetlen csontképződést. Kísérleteim során bioüvegkerámiákat állítottam elő előkezelt állati csont őrlemény és csapadékos módszerrel előállított hidroxiapatit felhasználásával.

Kulcsszavak: biokompatibilitás, kalcium-foszfát, hidroxiapatit, szemcseméret, porozitás

Bórral és bizmutteral módosított heterogén fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata

Preparation and Study of Boron and Bismuth Co-doped Heterogeneous Photocatalysts

FONYÓ Máté¹, KULCSÁR Petra¹, SZABÓNÉ Dr. BÁRDOS Erzsébet¹,
Dr. HORVÁTH Ottó¹, Dr. ZSIRKA Balázs², KRISTÓFNÉ Dr. MAKÓ Éva³,
Dr. DOBRÁDI Annamária³, Dr. JUZSAKOVA Tatjana²

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék¹
Környezetmérnöki Intézet², Anyagmérnöki Intézet³
8200 Veszprém, Egyetem utca 10., e-mail: fonyo.mate97520@gmail.com

ABSTRACT

The aim of our research is to prepare a visible light active heterogeneous photocatalyst, which can degrade organic pollutants dissolved in water, and which can be efficiently used as photoactive component of self-cleaning surfaces. Boron and bismuth co-doped TiO₂ was prepared by sol-gel procedure. The processes during calcination were inspected by thermal analysis. The structure of the nanoparticles produced was characterized by X-ray diffraction and Raman spectroscopy. Also the band gaps of these photocatalysts were measured. The photocatalytic activity was characterized by the production rate of hydroxyl radicals, in addition oxalic acid and titan yellow were used as target pollutants in the degradation experiments.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk célja olyan látható fénnel is gerjeszthető heterogén fotokatalizátorok előállítása volt, melyek képesek a vízben oldott szerves szennyezőanyagok lebontására, és hatékonyan alkalmazhatóak öntisztuló felületek fotoaktív komponenseként. Szol-gél eljárással bórral és bizmutteral módosított TiO₂ katalizátorokat állítottunk elő. Termikus analízissel követtük nyomon a kalcinálás során végbemenő folyamatokat. Raman spektroszkópiával és röntgendiffrakcióval vizsgáltuk a katalizátorok fázisösszetételét, valamint meghatároztuk gerjesztési küszöbenergiájukat is. Fotokatalitikus aktivitásukat egyrészt a hidroxilgyök képződési sebességével jellemeztük, másrészt a lebontási kísérletekben modellvegyületként oxálsavat és titánsárgát alkalmaztunk.

Kulcsszavak: fotokatalízis, titán-dioxid, látható fény, módosított katalizátor, öntisztuló felület

A kutatás az EFOP-3.6.1-16-2016-0001 projekt és az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-1 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság programjának támogatásával készült.

Újszerű diimin-alapú rézkomplexek kialakítása és használatuk fotoredox katalizátorként

Design of Novel Diimine-based Copper Complexes and Their Application as Photoredox Catalysts

FÖLDESI Tamás, NAGY Bálint, ADAMIK Réka, SIPOS Gellért, NOVÁK Zoltán

ELTE Katalízis és Szerves Szintézisek Kutatócsoport, Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) - Pázmány Péter stny. 1/A 1117 Budapest, Magyarország
E-mail: foldesit@zng.elte.hu Honlap: zng.elte.hu

ABSTRACT

Renewable resources became very important in the last decades. Accordingly, applying visible light in organic synthesis became one of the most examined area of the synthetic chemistry. In a photocatalytic reaction, a metal complex or an organic dye generates radicals which could take part in a catalytic cycle. One of the critical aspects of this synthetic technique is the use of expensive metal based catalysts. Beside this, catalyst ligands could be prepared by only cumbersome multistep syntheses.

Although many attempts were performed to use non-precious metals, for example copper, the chelating agents remained unchanged in most cases. Our work aimed to develop a cheap alternative of these complexes. Using copper as the metal core and diimine based ligand obtained from ethylenediamine and aromatic aldehydes we prepared a series of complexes, which could be used in photocatalytic reactions. After optimization of an initial atom-transfer radical addition (ATRA) reaction using styrene and carbon tetrabromide, an extensive structure-reactivity relationship was performed by systematic modification of the structure of the ligands.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az utóbbi évtizedekben kiemelkedően fontossá vált a megújuló erőforrások használata. Ennek megfelelően, a látható fény alkalmazása szerves szintézisekben a szintetikus kémia egyik vezető területévé vált. A fotokatalitikus reakciókban egy fémkomplex vagy egy szerves festékanyag szabadgyököket képez, amelyek azután katalitikus ciklusban tudnak részt venni. Az egyik kritikus problémája ezen szintetikus módszereknek, hogy rendkívül drága fémek szolgálnak a katalizátorok alapjául, és az elterjedt katalizátor-ligandumok előállítása is csak körülményes többlépéses szintézisekben valósítható meg.

Habár számos próbálkozás történt nem-nemesfémek használatára, mint a réz, a kelátligandumok a legtöbb esetben változatlanul maradtak. Munkánk céljával az ilyen komplexek olcsó alternatíváinak előállítását tűztük ki. Számos, fotokatalitikus reakciókban jól használható komplexet sikerült előállítanunk, melyeknek fémcentrumául réz, ligandumaként pedig etilén-diaminból és aromás aldehidekből származtatott diimineek szolgálnak. Először a sztirol és szén-tetrabromid atom-transzferes gyökös addícióját (ATRA) optimalizáltuk, majd egy átfogó szerkezet-reaktivitás összefüggés vizsgálatot végeztünk a ligandumok szerkezetének szisztematikus változtatásával.

Kulcsszavak: addíció, fotokémia, rézkomplexek, szerkezet-reaktivitás összefüggés.

Bioetanol cukornádból történő előállításánál visszamaradt szilárd hulladék hagyományos pirolízise

Conventional Pyrolysis of Solid Wastes Biomass Obtained from Sugar Cane Bioethanol Industry

Dr. GÁL Emese^a, Dr. SAUCIUC Anca^{a,b}, Dr. BRÉM Balázs^a, MOLNÁR Éva-Andrea^a

^aBabeş-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering,
Cluj-Napoca, Arany János Street, No. 11.

^bROCAT Synfuels SRL, Str. Valea Cetății nr. 22, Braşov, jud. Braşov

ABSTRACT

Pyrolysis is a promising technology for producing liquid fuel, as thermo-chemical degradation of lignocellulosic biomass into solid, liquid and gaseous fuel in the absence of an oxidizing agent¹. The physical and chemical composition of biomass will affect pyrolysis process and will have a significant influence over the properties and composition of pyrolysis products. The most effective catalysts used for biomass conversion to liquids are zeolite catalysts due to their porous structure and acidic properties².

Biomass samples received from Universidad del Valle, Cali-Colombia, have been used as feedstock for conventional pyrolysis. The chemical composition of pyrolysis bio-oils was determined using GC-MS-QP2010 Plus mass spectrometer, ¹³C-NMR, FT-IR measurements.

ÖSSZEFOGLALÓ

A pirolízis eljárás ígéretes technológia üzemanyag előállítására, mivel a lignocellulóz biomassza oxidálószer hiányában termokémiai lebomlása szilárd, folyékony és gáz halmazállapotú tüzelőanyagot eredményez¹. A biomassza fizikai és kémiai összetétele befolyásolja a pirolízis folyamatát, és jelentős befolyást gyakorol a pirolízis termékkeverék tulajdonságára és összetételére. A biomassza pirolízisének leghatékonyabbnak bizonyuló katalizátor típusok a zeolitok, melyek porózus szerkezetük és savas tulajdonságaik miatt használatosak².

A hagyományos pirolízis eljáráshoz használt biomasszát Cali-Columbia, Universidad de Valle szolgáltatta. A pirolízisből származó bio-olaj frakciók kémiai összetételének a meghatározása tömegspektrométerrel kapcsolt gázkromatográfiás, ¹³C-NMR valamint FT-IR mérésekkel történt.

Kulcsszavak: biomassza, pirolízis, GC-MS, FT-IR

Acknowledgment: This work was possible with the financial support of ERANET- LAC-EFCP 20/09. 2017 grants (Cooperare europeana si internationala CEI – H2020).

Irodalom

1. S.V. Singh, Z. Ming, P. S. Fennell, N. Shah, E. J. Anthony, *Progress in Energy and Combustion Science* 61, (2017), 189-248
2. Y. Serdar, *Energy Conversion and Management* 45 (2004) 651–671

Au, Pt/TiO₂ alapú kompozitok fotokatalitikus aktivitásának és ökotoxikológiai hatásának vizsgálata

Investigating the Photocatalytic Activity and Ecotoxicology of Au, Pt/TiO₂ Composite Photocatalysts

HAMPEL Boglárka¹, KOVÁCS Gábor^{2,3}, Czeges Zsolt³, HERNÁDI Klára¹, PAP Zsolt^{2,3}

¹ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék,
Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

² Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Környezettudományi és Műszaki Intézet, Környezetkémiai Kutatócsoport,
Tisza Lajos körút 103, Szeged, HU-6720

³ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem,
Kolozsvár, Treboniu Laurian utca 42, Cluj-Napoca, RO-400271

ABSTRACT

In the present research gold and platinum nanoparticles were deposited simultaneously on three different commercial titania photocatalysts (Evonik Aeroxide P25, Aldrich rutile and Aldrich anatase). For the synthesis of the composites two noble metal reduction methods (in situ and impregnation) and three noble metal deposition routes (i.e., by changing their deposition order, Au/Pt, Pt/Au, and Au-Pt simultaneously) were used. The photocatalytic performances of the nanocomposites were evaluated under UV irradiation, through degradation of oxalic acid and photocatalytic hydrogen production. The morphological and structural properties were studied/investigated by using DRS, TEM, HRTEM, EDX and XRD. Furthermore, the ecotoxicity of the composites was investigated using *Lemna minor* growth inhibition tests using static “lake” approach completed by DLS and ROS indirect measurements. The toxic effect of the composites which showed the highest photocatalytic activity did not differ from that of their commercial counterparts, showing that these nanoparticles were eco-friendly. This result shows the great capacity of these materials to be used in the next future in photocatalytic applications.

.Keywords: composites, phenol, *Lemna minor*, ecotoxicological investigations.

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen kutatásaink során arany és platina nanorészecskéket választottunk le három különböző kereskedelmi TiO₂ alapú fotokatalizátorra (Evonik Aeroxide P25, Aldrich rutil és Aldrich anatóz). A kompozitok előállítására két módszert (*in situ* és impregnálást) alkalmaztunk, három szintézis sorrendet alkalmazva (először egyik, majd a másik nemesfémeket valamint szimultán leválasztással). A nanokompozitok fotokatalitikus hatékonyságát UV megvilágítás alatt, oxálsav bontásán és hidrogén fejlesztésén keresztül vizsgáltuk. A szerkezeti sajátosságokat DRS, TEM, HR-TEM, EDX és XRD segítségével vizsgáltuk. További lépésként, a kompozitok ökotoxikológiai hatását is vizsgáltuk *Lemna minor* növekedés inhibíciós tesztek segítségével, DLS és ROS közvetett módszerek segítségével. Az eredmények azt mutatták, hogy a kompozitok hatása nem különbözött jelentősen a kereskedelmi katalizátorokétól, azt mutatva, hogy ezek az anyagok biztonsággal felhasználhatóak a jövő fotokatalitikus alkalmazásaiban..

Kulcsszavak: kompozitok, fenol, *Lemna minor*, ökotoxikológiai vizsgálatok.

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönetüket szeretnék kifejezni az anyagi támogatásért a GINOP-2.3.2- 15-2016- 00013 és a PN-III-P1-1.1-TE-2016-1588 pályázatoknak. K.G. köszönetét fejezi ki az NKFIH-PD-125311 pályázatnak az anyagi támogatásért.

**Királis vegyületek elválasztása során kialakuló
kölcsonhatások elméleti háttérének vizsgálata
HPLC és SFC módszerek alkalmazásával**

**Investigation of the Theoretical Background of Interactions
in the Separation of Chiral Compounds
Using HPLC and SFC Methods**

HORVÁTH Éva^{1,*}, RÉDEI Csanád¹, Dr. BOROS Borbála¹, Dr. FELINGER Attila^{1,2}

¹Pécsi Tudományegyetem, Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék,
7624 Pécs, Ifjúság útja 6,

²MTA-PTE Molekuláris Kölcsonhatások az Elválasztástudományban Kutatócsoport,
7624 Pécs, Ifjúság útja 6,

*e-mail: eva.horvath@gamma.ttk.pte.hu

ABSTRACT

Most biologically and pharmacologically important molecules are chiral compounds which may cause various biological effects, therefore increased attention is placed on the separation of two enantiomers. In this work, the separation of an anti-malarial drug, mefloquine was performed on a new generation chiral zwitterionic stationary phase (Zwix (-) column) using HPLC and SFC methods and studied the theoretical background of the separation.

ÖSSZEFOGLALÓ

Ismert, hogy a legtöbb biológiailag és farmakológiailag fontos molekula királis vegyület, amelyek különböző biológiai hatást fejthetnek ki, ezért napjainkban egyre nagyobb hangsúlyt fektetnek az enantiomerek elválasztására. Munkánk során egy malária ellenes gyógyszerhatóanyag, a meflokin enantiomerek elválasztását végeztem HPLC és SFC módszerekkel egy új generációs királis ikerionos állófázison (Zwix (-) oszlop), valamint vizsgáltam annak elméleti háttérét.

Kulcsszavak: enantiomer, HPLC, SFC, sztochasztikus modellezés, termodinamikai paraméterek

Gyulladás csökkentő és reuma elleni kenőcs fejlesztése és vizsgálata

The Development and Analysis of an Ointment for Inflammation Reduction and Reuma Treatment

Dr. JURCA Tünde ^{*1}, Dr. MARIAN Eleonora¹, Dr. PALLAG Annamária¹, Dr. VICAS Laura¹, Dr. SUCIU Ramona Nicoleta¹, Dr. BÁCISKAY Ildikó², Dr. FEHÉR Pálma²

¹University of Oradea, Medicine and Pharmacy Faculty, Department Pharmacy, Oradea, Pta Universitatii nr.1, Romania

²University of Debrecen, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Technology, Egyetem tér 1, Debrecen, Hungary

*Corresponding author: jurcatunde@yahoo.com, Tel:0040722476454

ABSTRACT

During our experiments, we developed a diclofenac and calendula officinalis containing ointment for external administration which contains penetration regulating and surface active components. We studied the ointment's homogeneity and consistency, and we also conducted in vitro examination, consequently studying the release of the active agent from the carrier and the penetration through a membrane with the Franz diffusion cell. With the antioxidant capacity measuring method that uses the DPPH radical's fixation we also measured the antioxidant capacity of the ointment.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kísérleteink során, külsőleges alkalmazásra fejlesztettünk ki egy diklofenákot és körömvirágot tartalmazó kenőcsöt, amely penetrációfokozó és felületaktív komponenseket tartalmaz. Ennek a kenőcsnek a homogenitás és konzisztencia vizsgálatát végeztük el, valamint az in vitro vizsgálat is kivitelezttük, melynek során a hatóanyag vivőanyagból történő felszabadulását és a membránon keresztüli penetrációját vizsgáltuk Franz diffúziós cella segítségével. A DPPH gyök megkötésén alapuló antioxidáns kapacitást mérő módszerrel a kenőcs antioxidáns hatását is lemértük.

Kulcsszavak: Gyulladás csökkentő kenőcs, diklofenák, körömvirág, in vitro, diffúziós cella

Szén nanocsövek alkalmazása a környezetvédelemben

Carbon Nanotubes for Environmental Mitigation

Dr. JUZSÁKOVA Tatjana¹, AL-JAMMAL Noor¹, Dr. CREȚESCU Igor²,
Dr. DOMOKOS Endre¹, Dr. CSAVDÁRI Alexandra³

¹ Institute of Environmental Engineering, University of Pannonia,
Veszprem, 10 Egyetem St., 8200 Veszprém, Hungary; e-mail: yuzhakova@almos.uni-pannon.hu

² Faculty Chemical Engineering and Environmental Protection,
"Gheorghe Asachi" Technical University of Iasi,
D. Mangeron 73, 700050 Iasi, Romania

³ Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Babes-Bolyai University,
Arany Janos 11, 4000028 Cluj-Napoca, Romania; e-mail: acsadari@chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

The goal of the research was to elaborate novel high performance adsorbents for cleaning up the surface waters. The surface modification of the multi-walled carbon nanotubes was implemented by a micro-emulsion technique. The properties of the unmodified and surface modified multi-walled carbon nanotubes were investigated by different techniques including BET and XRD. Found features were correlated with the petroleum removal efficiency by means of methods such as TOC and GC.

Keywords: modification of carbon nanotubes, adsorbents, waste water treatment, oil pollution

Acknowledgement: This work was supported by GINOP-2.3.2-15-2016-00016 project: Excellence of strategic R+D workshops: Development of modular, mobile water treatment systems and waste water treatment technologies based on University of Pannonia to enhance growing dynamic export of Hungary.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kutatómunka célja nagy hatékonyságú szén nanocsövek kifejlesztése volt környezetvédelmi aplikációkra. A szén nanocsövek modifikálása mikroemulziós technikával történt. A módosított és módosítatlan szén nanocsövek morfológiai és felületkémi vizsgálatát BET, XRD technikákkal történt. A különböző adszorbensek petróleum felszíni vizekből történő eltávolítási hatékonyságát különböző technikákkal (TOC, GC) követtük és korreláltattuk az adszorbensek felületi tulajdonságaival.

Kulcsszavak: szén nanocsövek modifikálása, adszorbensek, szennyvíztisztítás, olaj szennyezés

Funkcionális aldehid deformiláz enzimmodellek előállítása

Production of Functional Aldehyde Deformylase Enzyme Models

Dr. KAIZER József¹, Dr. KRIPLI Balázs¹, TÖRÖK Patrik¹

¹Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Kémia Intézet, Szerves kémia Intézeti Tanszék, H-8200 Veszprém, Wartha V. u. 1. • Telefon: (+36 88) 624-719 • www.uni-pannon.hu

ABSTRACT

In my research, I model the nonhem-type cyanobacterial aldehyde deformylase enzyme that plays an important role in nature and examine the deformylation reaction of the enzyme model with different substrate compounds. As a starting point, I generate the dual-core Fe(III) peroxo complexes *in situ* from Fe(II) precursor complexes by the addition of H₂O₂. I use as substrate phenylacetaldehyde and 2-phenylpropionaldehyde. The reaction is followed by UV-Vis spectroscopy and the catalytic reaction by GC-MS technique. These results can help you understand the functioning of oxidoreductase enzymes.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatómunkám során a természetben fontos szerepet betöltő nemhém-típusú cianobakteriális aldehid deformiláz enzimet modellezem és különböző szubsztrátvegyületekkel vizsgálom az enzimmodell deformilezési reakcióját. Kiindulásként Fe(II) prekursor komplexeket használok, melyekből *in situ* képzem, H₂O₂ hozzáadásával, a modellként szolgáló kétmagvú Fe(III) peroxo komplexet. Szubsztrátként fenilacetaldehidet és 2-fenil-propionaldehidet használok. A lejátszódó reakciót UV-Vis spektroszkópiával követem, illetve a katalitikus reakciót GC-MS technikával vizsgálom. Ezen eredmények segítségével közelebb juthatunk az oxidoreduktáz enzimek működésének megértéséhez.

Kulcsszavak: enzim, divastartalmú, nemhém, deformiláz

Magnézium-oxiddal módosított TiO₂ fotokatalizátorok előállítása és aktivitásuk vizsgálata

Synthesis and Characterization of Magnesium-oxide Doped TiO₂ Photocatalyst

KOCSIS Gábor¹, SZABÓNÉ Dr. BÁRDOS Erzsébet¹, Dr. HORVÁTH Ottó¹,
Dr. ZSIRKA Balázs², KRISTÓFNÉ Dr. MAKÓ Éva³, Dr. DOBRÁDI Annamária³,
Dr. JUZSAKOVA Tatjana²

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék¹
Környezetmérnöki Intézet², Anyagmérnöki Intézet³
8200 Veszprém, Egyetem utca 10., e-mail: kocsis.gabor03@gmail.com

ABSTRACT

In our work, titanium dioxide produced by a sol-gel process was modified by magnesium ions. Magnesium is a good candidate for this purpose because the ionic radii of Mg²⁺ (145 pm) and Ti⁴⁺ (176 pm) are not too different, hence magnesium ions can be built into the grid structure. The produced catalysts were characterized by X-ray diffraction (XRD), Raman-spectroscopy, and scanning electron microscopy (SEM). Also the band gaps of these photocatalysts were measured. Their activity were determined by measuring the amount of active radicals produced in photo-induced processes.

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során a szol-gél eljárással előállított titán-dioxidot magnéziumionokkal módosítottuk. A magnézium azért jó választás, mert a Mg²⁺ (145 pm) és a Ti⁴⁺ (176 pm) ionsugara meglehetősen közel van egymáshoz, így a magnéziumion könnyen be tud épülni a rácsszerkezetbe. Az előállított katalizátorokat röntgendiffrakcióval (XRD), Raman-spektroszkópiával, pásztázó elektronmikroszkópiás módszerrel (SEM) minősítettük, majd meghatároztuk gerjesztési küszöbenergiájukat. Aktivitásukat a fotoindukált folyamatokban keletkező aktív részecskék mennyiségének mérésével ellenőriztük.

Kulcsszavak: fotokatalízis, katalizátor, MgO-TiO₂, gerjesztési küszöbenergia, hidroxilgyök

A kutatás anyagi háttérét a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 és az EFOP-3.6.1-16-2016-00015 pályázatok biztosították.

A humán FER tirozin kináz molekuláris klónozása és heterológ expressziója

Molecular Cloning of Human Tyrosine Kinase FER and Heterologous Expression

KOVÁCS Zita¹, ALBERT Beáta^{1,2}, ORBÁN Kálmán-Csongor²,
NAGY Katalin¹, SALAMON Pál¹, LÁNYI Szabolcs^{1,2}

¹ Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar, 7624 Pécs, Ifjúság útja 6.

Tel.: +36-72503-600, Fax: +36-72-501-527, E-mail: kapcsolat@gamma.ttk.pte.hu

² Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Csíkszeredai Kar, Biomérnöki Tanszék, Csíkszereda, Hargita megye, Szabadság tér, 1. szám, 530104, Tel.: +40-266-314-657, Fax: +40-266-372-099, E-mail: csikszereda@sapientia.ro

ABSTRACT

In our days, the main purpose of many researches is to know the regulation of tyrosine kinase proteins and signaling pathways. Tyrosine kinases are signal transduction proteins capable of phosphorylation of tyrosine residues. The human FER kinase includes to the protein-tyrosine kinase oncogene family and it has role in tumore-related properties in many cancer types. Tyrosine-protein kinase Fer is an enzyme which regulates cell-cell adhesion and with the growth factor receptors mediates signaling from the cell surface to the cytoskeleton. It plays important role in the microtubule assembly and cell migration. In this study we designed primers to amplify the DNA sequence of FER kinase from human tissue. These amplified DNA sequence was cloned in pET20b vector to expression of these proteins in *Escherichia coli* cells.

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjainkban számos kutatás fő célját képezik a tirozin kináz fehérjék és jelátviteli útvonalak szabályozásának megismerése. A tirozin kinázok olyan jelátviteli fehérjék, amelyek képesek tirozin maradványok foszforilálására. A humán FER kináz a fehérje-tirozin kináz onkogén családba tartozik, és tumorral kapcsolatos tulajdonságaiban szerepet játszik számos rák típusban. A FER kináz egy olyan enzim, amely szabályozza a sejt-sejt adhéziót, és a növekedési faktor receptorokkal közvetíti a sejtfelszíntől a citoskeletonig történő jelátvitelt. Fontos szerepet játszik a mikrotubulus összeszerelésben és a sejtmigrációban. Kutatásunk során olyan primereket terveztünk, amelyek a FER kináz DNS-szekvenciáját amplifikálják az emberi szövetekből. Ezeket az amplifikált DNS-szekvenciákat pET20b vektorba klónoztuk, a fehérje *Escherichia coli* sejtekben való expressziójához.

Kulcsszavak: tirozin kináz, FER, rekombináns konstrukció, molekuláris klónozás, heterológ expresszió

A ZnO/Pt/redukált grafit-oxid hármass kompozit fotokatalizátorok előállítása és összehasonlítása kémiai redukciós és impregnálás módszerrel

Comparison of ZnO/Pt/rGO Ternary Composites Synthesized by Chemical Reduction with Multistep Impregnation and One-pot Synthesis Method

KOVÁCS Zoltán^{1,2,3}, FODOR Szilvia³, POP Lucian-Cristian⁴, PAP Zsolt^{1,5}

¹ Nanostructured Materials and Bio-Nano-Interfaces Center, Institute for Interdisciplinary Research on Bio-Nano-Sciences, Babeş – Bolyai University, Treboniu Laurian str. 42, RO-400271 Cluj-Napoca, Romania,

² Faculty of Physics, Babeş – Bolyai University, Str. Mihail Kogălniceanu nr. 1, 400084 Cluj- Napoca,

tel.: + 40 264 405300, fax: + 40 264 591906, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Department of Applied and Environmental Chemistry, University of Szeged, H-6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1, Hungary

⁴ Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Babeş – Bolyai University, Str. Arany János no. 11, RO-400028, Cluj Napoca, Romania, tel.: + 40 264 591998, fax: +40 264 590818, chem@chem.ubbcluj.ro

⁵ Institute of Environmental Science and Technology, University of Szeged, Tisza Lajos blvd. 103, HU-6720 Szeged, Hungary

ABSTRACT

In the present study, ternary composite of ZnO, Pt and reduced graphite oxide were prepared by chemical reduction with NaBH₄. The effect of each component upon the ternary system was investigated by "step-by-step" synthesis method followed by an impregnation to form the composite and compared to the one-pot synthesis of the ternary composite. The obtained materials were characterized by XRD, SEM, IR techniques and the photocatalytic activity was measured by the degradation of methyloange under UV light irradiation.

Keywords: NaBH₄, ZnO/Pt/rGO, ternary composite, chemical reduction, photocatalysis

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen kutatás során ZnO/Pt/redukált grafit-oxid tercier kompozit fotokatalizátor rendszert állítottunk elő kémiai redukciós módszer használatával. A komponensek kompozitra gyakorolt hatását a kompozit több lépéses redukciós előállítással, valamint impregnálással előállított vizsgálatával határoztuk meg. Az előállított katalizátorok jellemzése XRD, SEM, IR anyagvizsgálati módszerekkel határoztuk meg, valamint a fotokatalitikus aktivitást metilnarancs UV fény hatására történő bontása során határoztuk meg.

Kulcsszavak: NaBH₄, ZnO/Pt/rGO, tercier kompozit, kémiai redukálás, fotokatalízis

Köszönetnyilvánítás: Pap Zsolt köszönetét szeretné kifejezni a Magyar Tudományos Akadémia által meghirdetett Prémium posztdoktori kutatói programjának az anyagi támogatásért

Ikerionos állófázisok túlterheléses vizsgálata

Overloading Study of Zwitterionic Stationary Phases

KULÁGIN Renáta¹, Dr. BACSKAY Ivett², Dr. LINDNER Wolfgang³,
Dr. FELINGER Attila^{1,2,*}

¹Pécsi Tudományegyetem, Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék,
7624 Pécs, Ifjúság útja 6., Magyarország

²MTA–PTE Molekuláris Kölcsönhatások az Elválasztás-tudományban Kutatócsoport,
7624 Pécs, Ifjúság útja 6., Magyarország

³Department of Analytical Chemistry, University of Vienna,
Währinger Strasse 38, A-1090, Vienna, Austria, *felinger@ttk.pte.hu

ABSTRACT

Nowadays the enantioselective separation of chiral molecules has great importance, especially in pharmaceutical industry. On the Cinchona-alkaloid based Chiralpak ZWIX(+) and ZWIX(-) chiral stationary phases, simultaneous anion- and cation-exchange takes place. Nonlinear chromatography was used to investigate the retention mechanisms. The columns were overloaded, and the inverse method was used for the calculation of the parameters of bi-Langmuir isotherms.

ÖSSZEFOGLALÓ

Manapság a királis vegyületek enantioszelektív elválasztásának nagyon fontos szerepe van, kiváltképp a gyógyszeriparban. A kinolin alapú Chiralpak ZWIX(+) és ZWIX(-) királis állófázisokon egyidejűleg anion- és kationcsere is lejátszódik. Méréseink során nemlineáris kromatográfiát alkalmaztunk a retenció mechanizmusok megismerése céljából. Az oszlop-túlterheléses vizsgálatok során inverz módszer alkalmazásával meghatároztuk a bi-Langmuir izoterma paramétereit.

Kulcsszavak: királis elválasztás, kinin és kinidin alapú ikerionos állófázisok, nemlineáris kromatográfia, oszloptúlterhelés, inverz módszer

Makardij-modell fermentlevek ultraszűrésénél

Makardij-Model of Ultrafiltered Fermentation Liquids

LEMMER Balázs¹, SZPISJÁK-GULYÁS Nikolett², JÁKÓI Zoltán²,
Dr. KERTÉSZ Szabolcs², Prof. Dr. HODÚR Cecilia²

¹ Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet
H-6725 Szeged, Tisza Lajos krt. 103.

² Szegedi Tudományegyetem, Mérnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézet
H-6725 Szeged, Moszkvai krt 9.
lemmer@mk.u-szeged.hu

ABSTRACT

Membrane separation is a widely used technique where one of the important hurdles is the membrane fouling. The resistances, the driving force, the hydrodynamic properties of the membrane-liquid surface are the most significant influential parameters on permeate flux. Modelling of the membrane fouling is currently a focus area of the investigations. In our work, the barely known semi-empirical Makardij-model is shown on filtering the real and model fermentation liquids. The coefficients of the model were proved to be helpful to describe the two effects involved in flux changes. The dependency on speed of the crossflow was not verified in every experimental case. According to our measurements the dependency on speed of crossflow was undoubtedly proven on the fermentation broths, probably because of the particles with a wide range of size dissolved in them.

ÖSSZEFOGLALÓ

A membránszeparáció széles körben alkalmazott elválasztási eljárás, de alkalmazhatóságának jelentős akadálya lehet a membrán eltömődés. A membrán ellenállás, az egységnyi membránfelületre eső műveleti hajtóerő, a membrán-folyadék határfelület hidrodinamikai körülményei jelentős befolyásoló szereppel bírnak a permeátum fluxusára. A kutatások jelentős része a membráneltömődés modellezésével foglalkozik. Munkánkban a kevésbé ismert Makardij-féle félempirikus modellt alkalmaztuk modelloldatok és valós fermentlevek szűrésénél. A modell két együtthatója egyértelműen meghatározza a fluxust befolyásoló kétféle mechanizmus szerepét, ám az együtthatóknak az áramlási sebességtől való függetlensége nem minden esetben igazolható. Méréseink során a többféle, széles mérettartományba sorolható oldott komponenseket tartalmazó oldatok esetében (esetünkben fermentlé) a keresztáramlási sebességtől történő függés egyértelműen bizonyítható.

Kulcsszavak: Makardij-modell, fermentlé, keresztáram, ultraszűrés,

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönetet mondanak az EFOP-3.6.2-16-2017-00010-RING 2017 és az NKFIH/OTKA K-112096 programok pénzügyi támogatásának. Lemmer Balázs munkáját az Új Nemzeti Kiválóság Program (Emberi Erőforrások Minisztériuma; pályázati azonosító: UNKP-18-3-IV-SZTE-29) támogatta.

Titán dioxid fotokatalitikus aktivitásának vizsgálata *E. coli* esetében

The Effect of Titania on *E. Coli* Bacteria

LUKÁCS Alexandra^{1,2}, MÁTYÁS Eszter¹, SASZET Kata², PAP Zsolt^{2,3},
CZEKES Zsolt², PAPP Judit¹

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Biológia és Geológia Kar, Magyar Biológiai és Ökológiai Intézet, Clinicilor 5-7, Kolozsvár, RO-400006

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Nanostrukturált Anyagok és Bio-Nano Felületek Központja, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Treboniu Laurian 42, Kolozsvár, RO-400271

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezatkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar, Tisza Lajos krt. 103, Szeged, HU-6725

ABSTRACT

One of the most common causes of infections during hospitalization are the microorganisms which adhere to different surfaces and objects. There are several experiments, with the goal of designing easy to use materials which are effective and environmentally friendly, without the risk of creating multidrug resistant strains. The use of TiO₂ as photocatalysts seems to be a good option for creating effective antimicrobial surfaces. The antimicrobial effect of these are based on their photocatalytic activity and mechanical interactions. In the presence of light these create reactive radicals, which destroy the cellular walls of microorganisms. During our studies, we have observed the effect of TiO₂ on *E. coli* strains, in dark, under Vis or UV irradiation conditions. The antimicrobial effect was observable in all studied circumstances within 120 minutes.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kórházi fertőzések leggyakoribb okozói a különböző felületeken és eszközökön található patogén mikroorganizmusok. Számos kutatás zajlik, amelynek fő célja olyan anyagok kifejlesztése, amelyek alkalmazása egyszerű, hatékony és környezetbarát, de hatására nem áll fenn a veszély a multidrog rezisztens törzsek kialakulására. A TiO₂ fotokatalizátorkénti alkalmazása jó lehetőség a mikroorganizmusok hatékony elpusztítására. Antimikrobiális hatása a fotokatalitikus aktivitásán és mechanikai kölcsönhatáson alapszik. Fény jelenlétében keletkező reaktív oxigén gyökök roncsolják a baktériumok sejtfalát ezáltal elpusztítva őket. Kutatásunk során a TiO₂ antimikrobiális hatását *Escherichia coli* törzseknél vizsgáltuk, sötétben, látható-és UV- fényben. Mindhárom esetben megfigyelhető volt az antimikrobiális hatás már 120 percen belül.

Kulcsszavak: antimikrobiális hatás, fotokatalízis, TiO₂, *E. coli*

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönik az anyagi támogatást a PN-III-P1-1.1-TE-2016-1588 jelű pályázatnak, és az MTA Prémium posztdoktori pályázatának.

Ioncsere vizsgálata magas nátrium-klorid tartalmú közegben

Examination of Ion Exchange Capacity from High Sodium-Chloride Solution

MIHALKÓ Andrea¹, HARNÓCZ Lilla¹, FARKAS László¹, FODOR Károly¹,
KOVÁCS Gábor¹, NAGYNÉ BAGÓ Judit¹, VARGA Krisztina¹

¹BorsodChem Zrt. , H-3700 Kazincbarcika, Bolyai tér 1.

ABSTRACT

Ion exchange method is one of the most effective processes for adsorption of different metal ions. This research was focused on the elimination abilities of different metal ions under laboratory conditions in the case of high or extra high sodium-chloride concentration.

The type of the different ion exchange resins applied for the elimination of different metal ions is introduced in the following poster. The resin capacity and the selectivity change were studied modifying the flowing substance condition parameters (pH, temperature, etc.).

ÖSSZEFOGLALÓ

A különböző fémionok megkötésének egyik igen hatékony eszköze az ioncsérés eljárás. Laboratóriumi körülmények között megvizsgáltuk a különböző fémionok eltávolítási lehetőségeit a szokásoshoz képest nagy, egyes esetekben extrém magas nátrium-klorid koncentráció mellett.

A poszter keretein belül bemutatásra kerül, hogy a különböző fémionok eltávolítására milyen típusú ioncserélő gyantákat alkalmaztunk. Tanulmányoztuk a gyanták kapacitását, valamint az áramló közeg egyes paramétereinek módosításával (pH, hőmérséklet, stb) a gyanták szelektivitásának változását.

Kulcsszavak: ioncserélő gyanta, kapacitás, fémion eltávolítás

A fekete ribiszkében (*Ribes nigrum* L.) található antociánok Soxhlet-extrakciós kinetikájának vizsgálata

Kinetic Study of Soxhlet Extraction of Anthocyanins from Blackcurrant (*Ribes nigrum* L.)

drd. MIHOK Emőke^{1,2}, Dr. ALBERT Csilla², Dr. MOLNOS Éva², GYENGE Szidónia²,
drd. ANDRÁS Csaba Dezső²

¹Debreceni Egyetem, Mezőgazdaság-, Élelmiszertudományi és Környezetgazdálkodási Kar,
H-4032 Debrecen, Böszörményi út 138., Magyarország.
email: mihok.emoke@agr.unideb.hu

²Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Csíkszeredai Kar, Élelmiszertudományi Tanszék,
RO-530104 Csíkszereda, Szabadság tér 1., Románia.

ABSTRACT

Nowadays, the importance of integrate plant processing is growing, because valuable raw materials could be obtained from previously unused byproducts using additional operations in the technology. At the same time, the cultivation of blackcurrant is spreading in our region, a fruit that is primarily used for juice production by pressing. The recovery of the large amount of blackcurrant peel generated during the process is not solved, being composted or used as soil fertilizer, despite the fact that it contains high amount of valuable bioactive polyphenols and anthocyanin glycosides.

In our research, the kinetics of ethanol extraction of anthocyanins was studied using a modified laboratory Soxhlet extractor, which allowed sampling during the process. The increasing concentration of components in the samples was monitored with Carry 500 UV-VIS spectrophotometer at 544 nm wavelength. The qualitative analysis was performed by HPLC using a DAD detector and C18 column.

Keywords: blackcurrant, anthocyanins, Soxhlet extraction, solvent recirculation, kinetic parameters

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjainkban nagy fontossággal bír a növények integrált feldolgozása, amely során az eddig fel nem használt melléktermékekből értékes alapanyagok nyerhetők ki komplex feldolgozási műveletek részeként. Székelyföldön jelentős mennyiségű fekete ribiszke termesztés folyik, amelyet főként gyümölcslé előállítására használnak. A préselés során nagy mennyiségű héj keletkezik, melynek értékesítése nem megoldott. Sok esetben komposztálásra vagy talajban történő beszántásra kerül, annak ellenére, hogy nagy mennyiségben értékes bioaktív polifenolokat, antocián glikozidokat tartalmaz.

Kutatásunk során az antociánok etanollal történő extrakciós kinyerésének kinetikáját tanulmányoztuk egy módosított laboratóriumi Soxhlet-extraktort alkalmazva, mely lehetővé tette a folyamat közbeni mintavételt. A mintákban levő hatóanyag koncentrációját Carry 500 UV-VIS spektrofotométerrel követtük 544 nm hullámhosszon. A minőségi vizsgálatot HPLC készülékkel DAD detektorral és C18 oszloppal végeztük.

Kulcsszavak: fekete ribiszke, antociánok, Soxhlet-extrakció, oldószer recirkuláció, kinetikai paraméterek

Koffein meghatározása teákból HPLC-MS/MS módszerrel

Determination of Caffeine Content in Tea by Means of HPLC-MS/MS Method

Dr. MUNTEAN Norbert¹, SZEREDAI Bettina-Dóra, Dr. TÓTŐS Róbert

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és vegyészmérnöki Kar, Fizikai-kémia Tanszék
400 028 Kolozsvár (Cluj), Románia, str. Arany János nr. 11

Tel: +40-(0)264--593833; Fax: +40-(0)264-590818; www.chem.ubbcluj.ro; ¹email:
mtnorbi@gmail.com

ABSTRACT

The aim of this study was to determine the content of caffeine in four types of tea (white, green, oolong and black) by means of HPLC-MS method. The total caffeine content of tea leaf was also studied using ultrasound assisted extraction method.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az egyik leggyakrabban fogyasztott koffeintartalmú ital a *Camellia sinensis* teafűből készült tea. A teafű feldolgozása jelentősen befolyásolja annak koffeintartalmát. Kutatásunk során, felhasználva 12 teamintát, megállapítottuk, hogy milyen összefüggés van a teatípus (fekete, zöld, oolong, fehér) és annak a koffeintartalma között. Ultrahanggal segített extrakciót alkalmazva meghatároztuk a teafű teljes koffein tartalmát. Extrahálószerként benzooesav vizes oldatát illetve metanolt használtunk.

Kulcsszavak: tea, koffein, HPLC-MS/MS

Apoptózist inhibáló fehérjék BIR3 doménjának a bioszintézése, tisztítása és fehérje-fehérje interakciók vizsgálata

Biosynthesis, Purification and Protein-protein Interaction Studies of BIR3 Domain of IAP's

NAGY Katalin^{1,3}, Dr. ing. ORBÁN Csongor-Kálmán^{2,3}, Prof. Dr. ALBERT Beáta^{2,3}, ing. KOVÁCS Zita³, ing. SALAMON Pál^{2,3}, Prof. Dr. ing. LÁNYI Szabolcs^{1,2}

¹Universitatea Politehnică București, Facultatea de Chimie Aplicată și Știința Materialelor, Str. Gh. Polizu, Nr. 1-7, Sector 1, 011061 București, Tel: +4021-402 39 27, www.chimie.upb.ro

²Universitatea Sapientia, Facultatea de Științe Economice, Socio-Umane și Inginerești Miercurea Ciuc, Piața Libertății nr. 1., Miercurea Ciuc, 530104, județul Harghita, Tel: +40-266-314-657, e-mail: miercureaciuc@sapientia.ro

³University of Pécs, Faculty of Sciences, Institute of Chemistry, H-7624 Pécs, Ifjúság útja 6., Hungary

ABSTRACT

Present work highlights cloning, heterologous expression, purification and protein-protein interaction studies of BIR3 domain of IAP's (Inhibitor of Apoptosis Proteins). Genes of BIR3 domain was cloned into pMAL-p2x expression vector. This vector system contains as fusion partner maltose binding protein (MBP) and the signal peptide on pre-MBP directs fusion proteins to the periplasm. Successful shake flask expression was achieved in *E. coli* Rosetta (DE3) *pLysS* cells using Rich medium. The recombinant construct was isolated from periplasm and purified by affinity chromatography using amylose resin. Finally, protein-protein interaction experiments were executed with Second Mitochondria-derived Activator of Caspases (SMAC) protein on amylose resin.

The research work was supported by the project: Controlul funcțiilor celulelor dendritice cu semnale anti-inflamatoare și de moarte celulară- DCFANS (Code Project: PN-II-PT-PCCA-2013-4; Financing: Cere de finanțare Proiecte Colaborative de Cercetare Aplicativă)

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen munka az Apoptózist Inhibáló fehérjék BIR3 doménjainak, klónozását, heterológ expresszióját, tisztítását és fehérje-fehérje interakciós vizsgálatokat mutat be. A BIR3 doménokat kódoló géneket pMAL-p2x expressziós vektorba klónoztuk. Ez a vektor rendszer maltóz-kötő fúziós fehérjét tartalmaz és a pre-MBP szignál peptid a fehérjét periplazmatikus térbe küldi. A rázatott lombikos expressziót sikeresen valósítottuk meg *E. coli* Rosetta (DE3) *pLysS* sejteket alkalmazva R-táptalajban. A rekombináns fehérjét a izoláltuk a bakterium periplazájából, majd tisztítottuk amilóz gyöngyökön affinitás kromatográfiát alkalmazva. Végül a fehérje-fehérje interakciós kísérleteket SMAC (Second Mitochondria-derived Activator of Caspases) fehérjével végeztük amilóz gyöngyökön.

Kulcsszavak: Apoptózist Inhibáló fehérjék, BIR3 domén, heterológ expresszió, pMAL-p2x, Maltóz-kötő fehérje, periplazmatikus tér, fehérje-fehérje interakció.

A mezei katáng (*Cichorium intybus*) extraktumok fenolos vegyületeinek és antioxidáns kapacitásának vizsgálata

Study of *Cichorium Intybus* (Common Chicory) Extracts Phenolic Compounds and Antioxidant Property

Dr. PALLAG Annamária¹, Dr. JURCA Tünde¹, Dr. MARIAN Eleonora¹,
Dr. KISS Rita², Dr. VICAŞ Laura¹

¹Nagyváradai Egyetem, Orvosi és Gyógyszerészeti Kar, Gyógyszerészeti Szak
Romania, Oradea, P-ta 1 Decembrie nr. 10, cod 410073, Tel +40 259 411 454
e-mail: annamariapallag@gmail.com

²Debreceni Egyetem, Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet

ABSTRACT

Cichorium intybus, common chicory part of the Asteraceae family, is a perennial herbaceous plant with more and more known therapeutic use. The aim of our study was to studied the phenolic compounds and antioxidant property of the less studied aerial parts of common chicory.

The results of this study showed that the *Cichorium intybus* extracts are rich sources of phenolic compounds with antioxidant, DPPH radical scavenging activity and reducing power.

Keywords: common chicory, phenolic compounds, antioxidant property

ÖSSZEFOGLALÓ

A mezei katáng *Cichorium intybus*, az őszirózsafélék (Asteraceae) családjába tartozó növényfaj, melynek egyre több gyógyászati felhasználása ismert.

Munkánk célja a mezei katáng, kevésbé tanulmányozott, föld feletti részeiből kinyert extraktumok fenolos vegyületeinek és antioxidáns kapacitásának vizsgálata volt. Eredményeink azt mutatták, hogy a *Cichorium intybus* a fenolos vegyületek gazdag forrása, valamint DPPH gyökfogó és redukáló teljesítménnyel rendelkezik.

Kulcsszavak: mezei katáng, fenolos vegyületek, antioxidáns kapacitás

A platina-ón kötés számítási vizsgálata

The Theoretical Investigation of the Platinum-tin Bond

PAPP Tamara¹, KOLLÁR László^{1, 2}, KÉGL Tamás^{1, 2}

¹Pécsi Tudományegyetem, Szervetlen Kémia Tanszék, 7624 Pécs Ifjúság útja 6.

papptami0830@gmail.com

²MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport, 7624 Pécs, Ifjúság útja 6. kol-

lar@gamma.ttk.pte.hu; tkegl@gamma.ttk.pte.hu

ABSTRACT

The practical applications of transition metal-tin chemistry have a great importance for decades. The activity of Pt/Sn-containing systems in the hydroformylation reactions was first reported in the middle of the 1970s by Hsu and Orchin,^[1] as well as Schwager and Knifton.^[2] Parshall et al. studied the coordination properties of the trichlorostannate ligand with ¹⁹F NMR measurements, and they concluded, that SnCl₃⁻ has weak σ -donor and strong π -acceptor properties. It was also assumed, that the 5d orbitals of the tin are responsible for back-bonding.^[3]

I have investigated the electronic properties of the trichlorostannato ligand by means of various electronic structure methods (CDA, ETS-NOCV, NBO, DAFH and Bader analysis).^[4] In contrast to previous assumptions it has been found that it has a strong σ -donor and a weak π -acceptor ligand with similar coordination properties as the cyano ligand.

Kulcsszavak: ón(II)-klorid, hidroformilezés, katalitikus ciklus, ionos mechanizmus

ÖSSZEFOGLALÓ

Az átmenetifém-ón kémia gyakorlati alkalmazása már évtizedek óta nagy jelentőséggel bír. A Pt/Sn-tartalmú rendszerek hidroformilezési reakcióban mutatott aktivitásáról az 1970-es évek közepén Hsu és Orchin,^[1] valamint Schwager és Knifton számoltak be először.^[2] Parshall és munkatársai ¹⁹F NMR vizsgálatokkal tanulmányozták a triklorosztannát koordinációs tulajdonságait, és azt találták, hogy az ón(II)-klorid gyenge σ -donor és erős π -akceptor. Feltételezték továbbá, hogy a viszontkoordinációért az ón üres 5d pályái felelősek.^[3]

Munkám során megvizsgáltam a triklorosztannato ligandum elektronikus sajátságait számos kvantum-kémiai módszer segítségével (CDA, ETS-NOCV, NBO, DAFH valamint a Bader analízis).^[4] Ellentétben a korábbi mrgfontolásokkal, azt találtam, hogy a ligandum erős σ -donor és gyenge π -akceptor, koordinációs tulajdonságai pedig a ciano liganduméhoz hasonlóak.

Köszönetnyilvánítás: Köszönet illeti az OTKA K113177 pályázatát az anyagi támogatásért.

[1] Hsu, C. Y.; Orchin, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1975**, *97*, 3553–3553.

[2] Schwager, I.; Knifton, J. *J. Catal.* **1976**, *45*, 256–267.

[3] Parshall, G. W. *J. Am. Chem. Soc.* **1966**, *88*, 704–708.

[4] Papp, T.; Kollár, L.; Kégl, T. *J. Comput. Chem.* **2017**, *38*, 1712–1726.

Amidinek szintézise palládium-katalizált, *tert*-butil-izonitril beékelődéssel járó reakciókban

Palladium-Catalyzed Synthesis of Amidines via *tert*-Butyl Isocyanide Insertion

PÁLINKÁS Noémi¹, KOLLÁR László^{1,2} KÉGL Tamás^{1,2}

¹Pécsi Tudományegyetem, Szervetlen Kémia Tanszék,
7624 Pécs Ifjúság útja 6. noemi.palinkas@gmail.com,

²MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport,
7624 Pécs, Ifjúság útja 6. kollar@gamma.ttk.pte.hu, tkegl@gamma.ttk.pte.hu

ABSTRACT

Isocyanides are considered as important building blocks in organic synthesis since 1959.^[1] In the past decade isocyanides have been used as new, versatile C₁ building blocks in transition metal catalysed reactions. Isocyanides, which are isoelectronic with carbon monoxide undergo similar palladium-catalysed transformations.^[2] Thus, the corresponding amidines and ketimine-amidines were formed due to simple and double *tert*-butyl isocyanide insertion from 4-substituted iodobenzenes. The influence of various phosphines on the reaction activity and selectivity was also investigated.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az izocianidokat 1959 óta a szerves szintézisek fontos építőelemeinek tekinthetjük.^[1] Az elmúlt évtizedben azonban új, sokoldalú C₁-építőelemként alkalmazták az átmenetifém-katalizált reakciókban. A szén-monoxiddal izoelektronos izocianidok a palládium-katalizált szintézisek során is hasonló átalakulásokon mennek keresztül.^[2] Ezt kihasználva lehetőségünk nyílt az egyszeres *tert*-butil-izonitril beékelődéssel járó amidinek, illetve a kétszeres beékelődéssel járó ketimin-amidinek szintézisére *para*-szubsztituált jódbenzolokból kiindulva. Vizsgáltuk továbbá a különböző foszfinok hatását a konverzióra és a szelektivitásra.

Kulcsszavak: homogén katalízis, izonitril, amidin, ketimin-amidin, foszfin

Köszönetnyilvánítás: Köszönet illeti a Richter Gedeon Talentum Alapítványt anyagi támogatásáért.

[1] Ugi ; R. Meyr; U. Fetzer and C. Steinbrückner, *Angew. Chem.* 1959, 71, 386.

[2] T. Vlaar; E. Ruijter; B. U. W. Maes and R. V. A. Orru, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 7084.

Biobr és BiOBr-szén nanocső (CNT) alapú kompozitok *in situ* előállítása és jellemzése

In-situ Synthesis of BiOBr and Its Composites with Carbon Nanotubes (CNT) and Their Characterization

SHARMA Nikita^{1*}, PAP Zsolt^{2,3}, ÁBRAHÁM Imre⁴, HERNÁDI Klára¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

² Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar, Környezettudományi és Műszaki Intézet, Környezetkémiai Kutatócsoport, Tisza Lajos körút 103, Szeged, HU-6720

³ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Treboniu Laurian utca 42, Kolozsvár, RO-400271

⁴ UniChem Kft., Kistelek tanya 491, HU-6760

*nikita_sh18@yahoo.co.in

ABSTRACT

In the present work, BiOBr and its nano-composites with carbon nanotubes (CNT) in different compositions (0.5%, 1%, 2%) were successfully synthesized hydrothermally and further studied their influence on BiOBr structural features (including crystal size, morphology, optical properties, etc.). The synthesis was performed for both types of samples, with and without nanotubes, at different temperatures 120°C and 150°C and at different time intervals of 4:30hrs and 6:30hrs for optimizing these parameters.

X-Ray Diffraction (XRD), Scanning Electron Microscope (SEM), Transmission Electron Microscope (TEM) and Diffusion Reflectance Spectroscopy (DRS) measurements were performed to detect the structural and optical properties. The photocatalytic activity of the composites was also investigated using phenol solution as a model pollutant under UV and visible light source. The samples were withdrawn at specific time intervals and concentration of these samples were measured using high pressure liquid chromatography (HPLC).

Keywords: BiOBr, CNT, composites, phenol, photocatalysis

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk során BiOBr-t különböző mennyiségű szén nanocsövet (0,5%, 1% és 2%) tartalmazó nanokompozitokat állítottunk elő hidrotermális módszerrel, majd vizsgáltuk ezen anyagok szerkezeti sajátosságait (kristálméret, morfológia, optikai tulajdonságok stb.). A szintéziseket különböző hőmérsékleteken (120°C és 150°C) valamint időtartamon (270 és 390 perc) is elvégeztük, a paraméterek optimalizálása céljából.

Az előállított anyagok és kompozitok szerkezeti és optikai tulajdonságainak jellemzésére röntgen diffraktometriát (XRD), pásztázó- és transzmissziós elektronmikroszkópiát (SEM/TEM) valamint diffúz reflexiós spektroszkópiát használtunk. A kompozitok fotokatalitikus aktivitását fenolra vizsgáltuk, UV és látható megvilágítás alatt. A mintákat meghatározott időközönként gyűjtöttük be és vizsgáltuk a modellszennyező koncentrációját nagyhatékonyságú folyadék-kromatográfiás (HPLC) módszerrel.

Kulcsszavak: BiOBr, CNT, kompozitok, fenol fotokatalízis

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönetüket szeretnék kifejezni az anyagi támogatásért a Magyar-Indiai TÉT pályázatnak (TÉT_15_IN-1-2016-0013).

Hőkezelés hatása különböző mézfajták kémiai és fizikai tulajdonságára

Detection and Analysis of Adulteration of Marketed Honey Adulteration

Dr. TAMÁS Melinda¹, Dr. TONK Szende¹

¹Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem Kolozsvár, Csíkszeredai Kar,
Élelmiszer-tudományi Tanszék,

4100 Csíkszereda, Szabadság tér 1. Email: tamasmelinda@cs.sapientia.ro

²Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem Kolozsvár, Kolozsvári Kar,
Környezettudományi Tanszék,

RO-4100 Kolozsvár, Tordai út 4. Email: tonkszende@gmail.com

ABSTACT

Honey is one of our most ancient food products, which, due to its excellent dietary effects, continues to remain an important complement of human alimentation. The most appropriate parameters to determine the adulteration of honey are its saccharose and proline content, as well as its electrical conductance. During our research, we examined the physical and chemical characteristics (colour, taste, hygroscopicity, percentage of water contained, electrical conductance, pH value, saccharose, hydroxymethylfurfural and potassium content) of the honey of several producers, and compared them based on these parameters to the honeys available in commerce, studying potential alterations. As heat-treatment, warming is used worldwide in the case of honeys prone to crystallisation; we studied the changes of honey occurring as a result of heat-treatment. In relation to the changes resulting from the heating of honey especially the alterations of hydroxymethylfurfural (HMF) content and the diastase activity are examined in specialist literature, yet our goal was to investigate the effects on other characteristics, too.

Keywords: honey, adulteration, chemical composition, physico-chemical properties

ÖSSZEFOGLALÓ

A méz az egyik legősibb élelmiszerünk, mely kiváló étrendi hatása miatt a mai napig fontos kiegészítője az emberi táplálkozásnak. A hamisítás megállapítására legalkalmasabb paraméterek a szacharóz- és a prolin tartalom, valamint az elektromos vezetőképesség. Munkánk során vizsgáltuk több termelő mézének a fizika-kémiai tulajdonságait (szín, íz, higroszkóposság, víztartalom, elektromos vezetőképesség, pH-érték, cukrok, hidroximetil-furfurol (HMF)- és káliumtartalom), ezen paraméterek alapján összehasonlítottuk a kereskedelemben kapható mézekkel, vizsgálva az esetleges változásokat. Mivel a hőkezelést, melegítést a kristályosodásra hajlamos mézek esetében világszerte alkalmazzák, ezért vizsgáltuk a méz hőkezelés során bekövetkező változásait. A méz melegítése során bekövetkező változások esetén a szakirodalomban különösen a hidroximetil-furfurol tartalom és a disztáz-aktivitás változását elemzik, de célunk a többi tulajdonságra kifejtett hatást is vizsgálni.

Kulcsszavak: méz, kémiai összetétel, fizikai-kémiai tulajdonságok

Biokomponentst és Fischer-Tropsch paraffint tartalmazó polimerrel módosított bitumen reológiai vizsgálata

Rheological Investigation of Biocomponent and Fischer-Tropsch wax Containing Polymer Modified Bitumen

TÁLOSI Gréta¹, GERGÓ Péter¹, Dr. HOLLÓ András^{1,2}

¹Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék,
8200 Veszprém, Egyetem u. 10., www.vmfweb.uni-pannon.hu

²MOL Nyrt., 2440 Százhalombatta, Olajmunkás u. 2., www.mol.hu

ABSTRACT

In our experimental work, the heavy residue of bio-oil from pinewood fast pyrolysis and Fischer-Tropsch paraffin were used as additives to produce a higher performance asphalt binder. The former was mixed at 1, 5 and 10%, and the latter was mixed at 1, 3 and 5% with linear SBS-modified bitumen. In order to evaluate the effect of additives, rheological tests were carried out primarily. It was concluded that the resistance to stiffness and deformation improved favourably. Based on these tests the heavy residue and the FT paraffin could be blended with SBS-modified bitumen at 10% and 3% concentration, respectively.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kísérleteink során fenyőfa gyors pirolíziséből származó bioolaj nehéz maradékát és Fischer-Tropsch paraffint alkalmaztunk adalékként jobb teljesítményű aszfalt kötőanyag előállítására. Az előbbi 1, 5 és 10 % koncentrációban, utóbbit 1, 3 és 5% koncentrációban kevertük lineáris SBS-sel módosított bitumenhez. Az adalékok hatásának tanulmányozására elsődlegesen reológiai vizsgálatokat végeztünk. Megállapítottuk, hogy a merevség és a deformációval szembeni ellenállás kedvezően javult. Ezen vizsgálatok alapján a nehéz maradék 10% koncentrációban, az FT-paraffin 3% koncentrációban hozzákeverhető lehet SBS-sel módosított bitumenhez.

Kulcsszavak: polimerrel módosított bitumen, bioolaj nehéz maradék, Fischer-Tropsch paraffin, reológia, minőségjavítás

Ezüst-halogenid (AgX, X=Cl⁻, Br⁻, I⁻) látható fényben aktív fotokatalizátorok stabilitásának a vizsgálata

Stability Investigations of Visible Light Silver-halide (AgX, X=Cl⁻, Br⁻, I⁻) Photocatalysts

TÓTH Zsejke-Réka^{1, 2}, KOVÁCS Gábor^{2, 3}, PAP Zsolt^{2, 3}, HERNÁDI Klára¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Nanustrukturált Anyagok és Bio-Nano Felületek Központja, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Kutatóintézete, Treboniu Laurian utca 42, Kolozsvár, RO-400271

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet, Tisza Lajos krt. 130, Szeged, HU-6720

ABSTRACT

The stability of a (photo)catalyst depends on the influence of chemical/physical treatment, in order to not suffer any kind of transformation, returning to its original state after the whole process. The present work deals with investigation of stability of the silver halides.

The aim of our research was to synthesize AgX with different halide content, the morpho-structural characterization and examination of the photocatalytic activity of the as obtained silver halides. For the synthesis of AgX hydrothermal synthesis was used, for the characterization it was used transmission and scanning electron microscopy, X-ray diffractometry and diffuse reflectance spectroscopy. To assess the photocatalytic activity of silver halides degradation of methyl-orange was investigated as model pollutant under visible light irradiation. During the processes we observed that the ion radius of halides are correlated with the stability of catalyst. In the case of Cl⁻ containing samples, the silver appeared on the surface at the time of synthesis, in the case of Br⁻ containing samples, it appeared during the catalytical degradation while AgI was stable during each process.

Keywords: stability, silver-halide, Ag ion reduction

ÖSSZEFOGLALÓ

Egy (foto)katalizátor stabilitása abba rejlik, hogy kémia/fizikai kezelés hatására nem szenved semmilyen féle átalakulást és a folyamat végeztével visszakapható eredeti állapotában. Jelen kutatás ezüst halogenidek stabilitásának vizsgálatával foglalkozik.

Kutatásunk célja különböző halogenid tartalmú AgX előállítása, szerkezeti és morfológiai vizsgálata és fotokatalitikus aktivitásuk a jellemzése. A katalizátorok előállítása esetében hidrotermális szintézis módszert alkalmaztunk, azok jellemzésére pedig transzmissziós- és pásztázó elektronmikroszkópiás, röntgen diffrakciós, valamint diffúz reflexiós spektrometriás méréseket végeztünk. A fotokatalitikus aktivitásuk vizsgálatára metilnarancs modellszennyezőt alkalmaztunk, látható fény megvilágítása mellett. A folyamatok során észrevettük, hogy a halogenid ionsugara összefüggésbe hozható a katalizátor stabilitásával: a Cl⁻ tartalmú minták esetében az ezüst nanorészecske a szintézis idején kiválik a felületre, a Br⁻ tartalmú minták esetében csak a katalitikus bontás esetében van ezüst nanorészecske kiválás, miközben az AgI minták mindkét esetben stabilnak bizonyultak.

Kulcsszavak: stabilitás, ezüst halogenid, Ag ion redukció

Köszönetnyilvánítás: a szerzők köszönetüket szeretnék kifejezni a GINOP-2.3.2-15-2016-00013 azonosítóval rendelkező pályázatnak az anyagi támogatásért. P.Zs. köszönetét szeretné kifejezni az MTA Prémium posztdoktori kutatói programjának az anyagi támogatásért.

Különböző alakú Au nanorészecskék bioaktív üveggel alkotott kompozitjainak előállítása és jellemzése

The Synthesis and Characterization of Bioactive -glass Composites with Different Shaped Gold Nanoparticles

TÓTH Zsejke-Réka^{1, 2}, Lucian C. POP^{2,3,4}, MAGYARI Klára², PAP Zsolt^{2,4,5},
HERNÁDI Klára¹, Lucian BAIA^{2,4}

¹Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

²Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete,
Treboniu Laurian utca 42, Kolozsvár, RO-400271

³Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Arany János utca 11, Kolozsvár; RO-400028

⁴Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,
Mihail Kogălniceanu utca 1, Kolozsvár; RO-400084

⁵Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet,
Környezatkémiai Kutatócsoport, Tisza Lajos krt. 130, Szeged, HU-6720

ABSTRACT

Widespread use of gold nanoparticles (AuNPs) is not surprising due to their unique physical and chemical properties. On the other hand, the bioactive glasses (BG) can be easily bind to the living organisms, without leading any scar tissue. The purpose of our research is the synthesis of different shaped AuNPs (nanotriangles, spherical nanocages and nanospheres), then preparing their composites with BG. For the characterization of the obtained nanoparticles were used TEM and UV-Vis spectroscopy, and for characterization of the composites were used TEM, SEM, XRD and UV-Vis spectroscopy. It is necessary to use Ag nanoparticles for the synthesis of spherical nanocages, whose presence produced a positive character for the BG-AuNPs composites. In the processes we have noticed that when the BG was heat treated, AuNPs were transformed into spherical nanostructures of various sizes.

Keywords: gold nanoparticles, bioactive glasses, shape-tailoring

ÖSSZEFOGLALÓ

Az arany nanorészecskék széles körű alkalmazása nem meglepő az egyedülálló fizikai és kémiai tulajdonságaikból adódóan. Mindemelllett a bioaktív üvegek könnyen képesek kötődni az élő szervezetekhez, anélkül, hogy bármilyen hegszövetet eredményezne a kötődés. A kutatásunk célja különböző alakú (nanoháromszög, gömb alakú nanoketrecék és nanogömbök) arany nanorészecske szintézise, majd kompozitba vitele bioaktív üvegekkel. A keletkezett részecskék jellemzése transzmissziós elektronmikroszkóppal, UV-Vis spektroszkóppal, illetve a keletkezett kompozitok jellemzése transzmissziós- és pásztázó elektronmikroszkóppal, röntgen diffrakgrammal, illetve UV-Vis spektrométerrel. A gömb alakú nanoketrecék előállításakor elengedhetetlen az Ag nanorészecskék használat, amelyek jelenléte pozitív hatást idézett elő a bioaktív üvegek kompozitba vitelekor. A folyamatok esetében észrevettük, hogy a bioaktív üvegek hőkezelésekor az arany nanorészecskék minden esetben átalakultak különböző méretű nanogömböké.

Kulcsszavak: arany nanorészecske, bioaktív üveg, alakváltoztatás

Acknowledgements This work was supported by a grant of the Romanian National Authority for Scientific Research and Innovation, CNCS-UEFISCDI, project number PN-III-P1-1.1-TE-2016-1324.

Akridon egységet tartalmazó koronaéter előállítása és alkalmazása szenzormolekulaként

Synthesis of a Crown Ether Containing an Acridone Unit and its Application as a Sensor Molecule

TÓTH Tünde (PhD)^{1,2}, GOLCS Ádám², HORVÁTH Viola (PhD)³,
BALOGH György Tibor (PhD)⁴, HUSZTHY Péter (DSc)²

¹ MTA Energiatudományi Kutatóközpont, Sugárkémiai Laboratórium, H-1121, Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33. <http://www.energia.mta.hu>
E-mail: toth.tunde@energia.mta.hu

² Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, H-1111, Budapest, Szent Gellért tér 4. <http://www.oct.bme.hu>
E-mail: ttoth@mail.bme.hu, golcs.adam@gmail.com, huszthy@mail.bme.hu

³ Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, H-1111, Budapest, Szent Gellért tér 4. <http://iaachem.bme.hu>
E-mail: vhorvath@mail.bme.hu

⁴ Richter Gedeon Nyrt., Szintézistámogató Laboratórium, H-1103, Budapest, Gyömrői út 19-21. <https://www.richter.hu>, E-mail: gy.balogh@richter.hu

ABSTRACT

Lead(II) ion is a highly poisonous metal ion for the aquatic environment. We have synthesized and characterized a new racemic crown ether containing an acridone unit with the aim of using as an electroactive ionophore in potentiometric sensing. The sensor molecule was incorporated into a plastized PVC membrane. This electrode is suitable for the selective quantitative analysis of lead(II) ions in the presence of many additional metal ions.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az ólom(II)-ion nagyon mérgező fém a vízi környezetre nézve. Új, akridon egységet tartalmazó koronaétert állítottunk elő és karakterizáltunk annak érdekében, hogy elektroaktív ionofórként használjuk potenciometriás érzékelőkben. A szenzormolekulát PVC membránba építve, a kapott elektród alkalmas ólom(II)-ionok kvantitatív analizésére más fémionok jelenlétében.

Kulcsszavak: koronaéter, akridon egység, molekuláris felismerőképesség, ionszelektív-membrán, ólomion-szenzor.

Olajemulziók ózonos előkezeléssel intenzifikált ultraszűrésére különböző polimer membránok esetében

Pre-ozonation for Intensified Ultrafiltration of Oil-in-water Emulsions in Case of Different Polymer Membranes

Dr. VERÉB Gábor^{1,*}, VÉGH Júlia¹, Dr. KERTÉSZ Szabolcs¹, Dr. BESZÉDES Sándor¹, Prof. Dr. HODÚR Cecília^{1,2}, Dr. LÁSZLÓ Zsuzsanna^{1,*}

¹Szegedi Tudományegyetem, Mérnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézet, H-6725, Szeged, Moszkvai krt. 9. (Tel.: 06-62-546558; <http://www.mk.u-szeged.hu>)

²Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet, H-6720, Szeged, Tisza Lajos krt. 103. (Tel: 62/546-940; <http://www2.sci.u-szeged.hu/kti/index/index.php>)
E-mail: *verebg@mk.u-szeged, zsizsu@mk.u-szeged.hu

ABSTRACT

In this study pre-ozonation was investigated as a pre-treatment to achieve higher fluxes during the ultrafiltration of oil-in-water emulsions. Pre-ozonation significantly modified the surface Zeta-potential of the oil droplets which resulted reduced accumulation of the hydrophobic contaminants on the membrane surface and higher fluxes in case of all the 3 investigated ultrafilter polymer membranes. Filtration experiments were carried out using ultrapure- and model groundwater matrices for a deeper discussion of available advantages. In overall, pre-ozonation decreased the total filtration resistance in all cases, however, the ratios of reversible and irreversible resistances and flux reduction rates were strongly dependent from both the matrix and the membrane surface material.

Keywords: oil-in-water emulsion, ultrafiltration, ozonation, pre-treatment, Zeta-potential

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen tanulmányban olajemulziók ultraszűrése során vizsgáltuk az ózonos előkezelés alkalmazhatóságát a magasabb fluxusok elérésére. Az ózonos előkezelés jelentős mértékben változtatta meg az olajcseppek felületi Zeta-potenciál értékeit, ami csökkentette a hidrofób szennyeződések felhalmozódását a membránfelületen és növelte a fluxusokat mindhárom vizsgált polimer membrán esetében. A szűrési vizsgálatokat nagytisztaságú- és modell rétegvíz mátrixokban is elvégeztük az elérhető előnyök részletesebb tárgyalása érdekében. Összességében az ózonos előkezelés minden esetben csökkentette a teljes szűrési ellenállást, de a reverzibilis- és az irreverzibilis ellenállások aránya és a fluxuscsökkenések mértékei is erősen függtek a vízmátrixtól és a membránfelület anyagától is.

Kulcsszavak: olajemulzió, ultraszűrés, ózonkezelés, előkezelés, Zeta-potenciál

Köszönetnyilvánítás: A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (Magyar Tudományos Akadémia) és az Új Nemzeti Kiválóság Program (Emberi erőforrások Minisztériuma; pályázati azonosító: ÚNKP-18-4-SZTE-78) támogatásával készült. A szerzők hálását továbbá a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal által (NKFI-K-112096; 2017-2.3.7-TÉT-IN-2017-00016), illetve az Emberi Erőforrás Fejlesztési Operatív Program (EFOP-3.6.2-16-2017-00010, RING-2017) által nyújtott anyagi támogatásokért is.

Szállópor minták kémiai elemzése a Csíki-medencében

Chemical Analysis of Particulate Matter (PM₁₀) in the Ciuc Basin

AKÁCSOS Beáta-Emese¹, Dr. SZÉP Róbert^{1,2}, Drd. KERESZTESI Ágnes^{1,2},
Drd. BOGA Réka^{1,2}, Dr. BODOR Zsolt¹, Dr. TONK Szende³, Dr. MIKLÓSSY Ildikó¹

¹Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem,
Csíkszeredai Kar, Csíkszereda, Hargita megye, Szabadság tér, 1. szám, 53010,

²Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Pécs, Ifjúság útja 6., 7624

³Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Kolozsvári Kar,
Kolozsvár, Kolozs megye, Tordai út, 4. szám, 400193

ABSTRACT

The present study analyzes the concentration of particulate matter in ambient air and indoor air, examining their degree of pollution. The purpose of the study is to improve indoor air quality reducing the concentration of particulate matter (PM₁₀). In the examined indoor and outdoor samples the following elements occur: O, C, Si, Ca, Al, K, Fe, Na, S, Mg, Ti, P, Cl, Mn, Sr, Zn, W, N, Ba and Cu. The analysis of ambient air samples revealed Si, Ca, K and Al have anthropogenic origins, while Ti originates from natural sources.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kutatás a kültéri és beltéri levegő szállópor koncentrációját elemzi, vizsgálja azok szennyezésének mértékét, célja a benti levegő minőségének javítása, annak szállópor (PM₁₀) koncentrációjának csökkentése. A megvizsgált kültéri és beltéri mintákban a következő elemek fordultak elő: O, C, Si, Ca, Al, K, Fe, Na, S, Mg, Ti, P, Cl, Mn, Sr, Zn, W, N, Ba és Cu. A kültéri minták elemzése során kiderült, hogy a Si, K, Ca, Al eredete antropogén forrású, a Ti természetes forrású, ezeket a dúsulási faktorok támasztják alá. A beltéri minták esetén, a hasonlóan a kültérihez, a Si, K, Ca, Al szintén antropogén forrásokból származnak, a Ti pedig természetes forrású.

Kulcsszavak: szálló por, levegőszennyezés, geoakkumulációs index, szennyezőanyag-terhelési index

Indol és fenotiazin alapú vegyületek szintézise és optikai tulajdonságaik vizsgálata

Synthesis of Indole and Phenothiazine Based Compounds and their Optical Properties

BARABÁS Laura-Edit, Dr. GÁL Emese

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Arany János utca 11, Kolozsvár, Románia,
e-mail: barabaslaura53@gmail.com

ABSTRACT

Indole and phenothiazine represent an important scaffold for heterocyclic compounds [1] [2]. An important class of these heterocyclic compounds is the Schiff bases, which are formed by the condensation of a carbonyl-containing compound and a primary amine. The spread of these materials was made possible by their versatility. In recent years their application extended in modern technologies, such as photostabilisation, coloring agent for solar collectors and in case of optical computers [3].

In this paper we present the synthesis of heteroaromatic Schiff bases starting from indole and phenothiazine derivatives, their structure characterization (MS, NMR) and photophysical properties (UV-Vis, FL).

ÖSSZEFOGLALÓ

Az indol és a fenotiazin fontos heterociklusos vegyületek alapvázát képezik [1][2]. Ezen vegyületek egy igen fontos csoportját képezik a Schiff-bázisok, melyek egy karbonilcsoportot tartalmazó vegyület és egy primer amin kondenzációjából alakulnak ki. Ezen anyagok elterjedését meglehetősen sokoldalú felhasználásuk tette lehetővé. Az utóbbi években a modern technológiákban is alkalmazást nyertek, mint fotostabilizátor, napkollektorok színezéke, valamint optikai számítógépekben [3].

A jelen tanulmányban bemutatjuk az indol-, illetve funkcionális fenotiazin-származékokból kiindulva szintetizált heteroaromás Schiff-bázisokat, szerkezetük felderítését (MS, NMR), illetve fotofizikai tulajdonságaik tanulmányozását (UV-Vis, FL).

Kulcsszavak: 3-formil-indol; 10-metil-3-formil-fenotiazin; Schiff-bázis; fotofizikai tulajdonság

- [1] Y. Chen, J. Xie, Z. Wang, J. Cao, H. Chen, J. Huang, J. Zhang, J. Su, *Dyes and Pigments*, 2016, 124, 188-195
- [2] R. R. Gupta, *Bioactive Molecules*, 1988, 4, 705 –774
- [3] B. Katarzyna, Ł.-C. Elżbieta, *Chemik*, 2014, 68 (2), 129–134

Fotogenerált elektrontranszfer biológiai (WO₃/RC) és szervetlen (WO₃/TiO₂) rendszerekben

Photogenerated Electron Transfer in Biological (WO₃/RC) and Inorganic (WO₃/TiO₂) Systems

BOGA Bíborka^{1*}, SZÉKELY István^{2,3}, CSEKŐ Richárd⁴, KOVÁCS Gábor^{3,5},
PAP Zsolt^{3,5}, BAIÁ Monica^{2,3}, HERNÁDI Klára⁶, NAGY László⁴

¹ BBTE, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Arany János utca 11, Kolozsvár, RO-400028

² BBTE, Fizika Kar, Mihail Kogălniceanu 1, Kolozsvár; RO-400084

³ BBTE, Nanustruktúrált Anyagok és Bio-Nano felületek Központja, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Kutatóintézete, Treboniu Laurian 42, Kolozsvár, RO-400271

⁴ SZTE, Orvosi Fizika és Orvosi Informatikai Intézet, Korányi fasor 9, Szeged, HU-6720

⁵ SZTE, Környezettudományi és Műszaki Intézet, Tisza Lajos krt. 130, Szeged, HU-6720

⁶ SZTE, Természettudományi és Informatika Kar, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720, *bogabiborka@yahoo.com

ABSTRACT

WO₃ is a well-known metal oxide with a widespread applicability spectra (gas sensors, energy efficient smart windows, etc.). Lately significant attention was paid to composites based on WO₃ consisting of either metal-oxides (TiO₂, ZnO) or noble metals (Au, Pt). Due to the implication of WO₃ as a charge separator, these composites can be used efficiently as bioelectrical components (WO₃/RC, RC: photosynthetic reaction center protein) and as photocatalysts (WO₃/TiO₂) for the degradation of several organic pollutants, too. In this work, mathematical model based on the Langmuir-Hinshelwood mechanism was built for oxalic acid degradation using composites containing star-like WO₃ and commercial TiO₂ in different ratio (50-50, 63-37, 76-24, 90-10, 99-1 %). Our curiosity led us studying the physisorption between differently shaped WO₃ and the reaction centre isolated from *Rhodobacter sphaeroides*, due to high quantum yield ($\approx 100\%$) of the primary charge separation in the reaction centre.

Keywords: charge separation, WO₃-TiO₂, Langmuir-Hinshelwood mechanism, photosynthetic reaction centre

ÖSSZEFOGLALÓ

A WO₃ egy közismert fémoxid széleskörű alkalmazhatósági palettával (gázszenzorok, elektrokromatikus ablakok stb.). A WO₃ fém-oxidokkal (TiO₂, ZnO) vagy nemesfémekkel (Au, Pt) alkotott kompozitjai jelentős figyelmet kaptak az utóbbi időben. A WO₃ töltés-szétválasztás folyamatokban vállalt szerepével magyarázható a WO₃ alapú kompozitok hatékony bioelektronikai (WO₃/RC, RC: fotoszintetikus reakciócentrum fehérje) és bizonyos szerves szennyezők esetén fotokatalizátorkénti (WO₃/TiO₂) alkalmazhatósága. Kutatásunk során modelleztük az oxálsav bomlását különböző tömegarányban kereskedelmi TiO₂-ot és csillag alakú WO₃-ot tartalmazó kompozitokkal (50-50, 63-37, 76-24, 90-10, 99-1 %), ahol a matematikai modellhez a Langmuir-Hinshelwood mechanizmust alkalmaztuk. Mivel a bíborbaktériumból (*Rhodobacter sphaeroides*) izolált RC esetében magas kvantumhasznosításról ($\approx 100\%$) számol be a szakirodalom az elsődleges töltésszétválasztásnál, kíváncsiságunk arra ösztönzött, hogy vizsgáljuk a RC és a különböző alakú WO₃ kompatibilitását.

Kulcsszavak: töltésszétválasztás, WO₃-TiO₂, Langmuir-Hinshelwood mechanizmus, fotoszintetikus reakciócentrum

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönik az anyagi támogatást a PN-III-P1-1.1-TE-2016-1588 jelű pályázatnak. Boga Bíborka köszönetét szeretné kifejezni a Balassi Intézet Márton Áron Tehetséggondozó Programján keresztül kapott támogatásért.

mikroRNS-ek poliadenilációjának vizsgálata nanorészecskék jelerősítésén alapuló módszerrel

Nanoparticle-amplified Measurements of Polyadenylation of microRNAs

BOGNÁR Zsófia, SIMON László Ferenc, Dr. GYURCSÁNYI E. Róbert

BME Lendület Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék,
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.,
zsofi.bognar6@gmail.com, www.biochemsens.bme.hu

ABSTRACT

As a target of our research, hsa-miR-208a microRNA was chosen, which a potential biomarker of acute myocardial infarction is. Its level can significantly increase at an early stage of myocardial injuries. Even the elevated microRNA concentration is still extremely low to measure, direct methods cannot guarantee adequate limit of detection. To overcome this limitation, an amplification method is required. In this work we developed an assay based on the polyadenylation of the microRNA and nanoparticle amplified SPRi (Surface Plasmon Resonance Imaging) detection. The selectivity of the assay is ensured by complementary peptide nucleic acids (PNAs) immobilized on the gold surface of the SPRi biochip.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk céljával a hsa-miR-208a mikroRNS mérésének kidolgozását választottuk. Ezen biomarker koncentrációja szívizomsérülések esetén megnövekszik a vérben, ezáltal már korai fázisban is lehetővé teszi a szívinfarktus diagnosztizálását. A megfelelő kimutatási határ elérése érdekében poliadenilációt, valamint DNS-sel módosított nanorészecskén alapuló assay-t alkalmaztunk. A módszer szelektivitását az SPRi (képalkotó felületi plazmon rezonancia) chip aranyfelületére immobilizált, a miR-208a szekvenciájával komplementer PNS (peptid-nukleinsav) szálak biztosítják. Az így kidolgozott módosított arany nanorészecskék jelerősítésén alapuló módszer egyszerre teszi lehetővé a mikroRNS szelektív és érzékeny detektálását.

Kulcsszavak: mikroRNS, poliadeniláció, arany nanorészecske, képalkotó felületi plazmon rezonancia (SPRi), peptid-nukleinsav (PNS),

A *Petroselinum Crispum*-ból nyert fenilalanin ammónia-liáz (PcPAL) helyspecifikus immobilizálása

The Site-specific Immobilization of Phenylalanine Ammonia-lyase (PAL) from *Petroselinum crispum*

BOROS Krisztina¹, Drd. MOISA Elena Mădălina¹, Dr. BENCZE László Csaba¹

¹Biokatalízis és Biotranszformációk Kutatóközpont, Kémia és Vegyészmérnöki kar, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Arany János utca 11, RO-400028 Kolozsvár, tel. 40-264-591998, fax: 40-264-590818

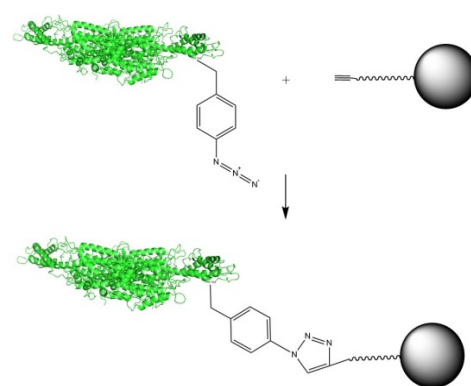
e-mail: krisztinabrs@yahoo.com; csibencze@chem.ubbcluj.ro,

web: <http://www.chem.ubbcluj.ro/~csibencze>

ABSTRACT

The phenylalanine ammonia-lyase (PAL) enzymes catalyze the reaction converting L-phenylalanine to trans-cinnamic acid. A large variety of applications of these enzymes are known in the chemical industry, with important role in the synthesis of the unnatural phenylalanine analogs starting from variously substituted cinnamic acids. Currently, the enzyme's low thermal and proteolytic stability, respectively the high decrease of the catalytic activity during their immobilization, are the main difficulties in the spread of the PAL-based technologies.

During our research we focused on the site specific immobilization of the recombinant PAL from *Petroselinum crispum* (PcPAL) to a solid, surface-modified support. In case of the site specific immobilization the enzyme binds to the carrier from a single, well-selected, controlled point, which is achieved through replacing the selected amino acid, from the sequence of the protein, to *p*-azido-phenylalanine (pAzPhe), which upon the “click” reaction will connect to the terminal alkyne attached to the support (Fig. 1). Selecting the phenylalanine residues located on the surface of the protein and distant to the active site, we replaced their codons to the Stop codon. Then, using a recombinant plasmid which encodes a pAzPhe-aminoacyl-tRNA-synthetase enzyme, we expressed and isolated the modified recombinant PAL enzyme, which can be immobilized through the click reaction to an alkyne-linker containing support.



1. Figure: The site-specific immobilization of Phenylalanine ammonia-lyase (PAL) from *Petroselinum crispum*

ÖSSZEFOGLALÓ

A fenilalanin ammónia-liáz (PAL) enzimek az ammónia β -eliminációját katalizálják L-fenilalaninról *transz*-fahéjsavat képezve. Ezen enzimek vegyipari alkalmazása is ismert a nem természetes fenilalanin analógok szintézisében, különbözőképpen szubsztituált fahéjsavakból kiindulva. Jelenleg az enzim alacsony fokú termikus illetve proteázhasítás elleni stabilitása, valamint a szilárd hordozóra való rögzítés során észlelt nagyfokú aktivitás veszteség jelenti a fő akadályt a PAL alapú biotechnológiák elterjedésében.

Kutatásunk során a *Petroselinum crispum*-ból származó rekombináns PAL (PcPAL) hely specifikus rögzítését terveztük szilárd, módosított felületű hordozót használva. A hely specifikus rögzítés esetén az enzim egyetlen, jól kiválasztott, kontrollált pontban kötődik a hordozóhoz, azáltal, hogy az enzim szerkezetében génmutáció révén egy aminosavat *p*-azido-fenilalaninra (pAzPhe) cserélünk ki, mely a “click” reakció révén kapcsolódik a hordozó felületén lévő terminális alkin kötéshez (Fig. 1). Kiválasztva az enzim felületén, valamint a katalitikus központtól távol eső fenilalaninokat, végrehajtottuk ezeknek “Stop” kodonná való mutációit, majd rekombináns pAzPhe-aminoacil-transzferRNS-szintetáz enzimet kódoló plazmidot használva megkaptuk a módosított PAL enzimet, mely a továbbiakban alkalmas a hely specifikus rögzítésre.

Kulcsszavak: PAL, helyspecifikus immobilizálás, *p*-azido-fenilalanin, “click” reakció, “Stop” kodon

Kurkumin származékok szintézise, szerkezeti és optikai tulajdonságaik vizsgálata

Synthesis, Structural and Photophysical Characterization of Curcumin Derivatives

BÚS Zoltán-Tamás¹, Dr. GÁL Emese¹

¹Babeş – Bolyai Tudományegyetem, Kémia és vegyészmérnöki kar,
Arany János utca 11, RO-400028, Kolozsvár, Románia
E-mail: bus_zoltan_tamas@yahoo.com

ABSTRACT

Turmeric has been one of the major constituents of Far Eastern medicine for centuries due to its high bioactivity, while also being a widespread coloring substance for foods. Following its first synthesis, several studies have been carried out related to curcuma's most prominent component, curcumin. Generally curcumin and its derivatives are synthesized using acetyl-acetone and an aromatic benzaldehyde, in the presence of boric anhydride, trialkyl-borate and a primary amine [1]. There have been many efforts to replace boric anhydride as starting material in the synthesis, and so several curcumin derivatives were obtained using boron trifluoride [2], boric acid under microwave-assisted conditions [3] with moderate to excellent yields. The photophysical properties of curcumin derivatives are strongly dependent on solvent polarity, substituents on the phenyl rings and the metal ion in case of complexes [4]. The present study is concerned about the synthesis, structural analysis of different curcumin derivatives and their complexes, its main goal being the photophysical characterization of the mentioned compounds.

ÖSSZEFOGLALÓ

Nagymértékű bioaktivitásának köszönhetően a kurkuma évszázadokon keresztül a távolkeleti medicina egyik legfontosabb és leggyakrabban használt gyógyszere volt, mindemellett ételszínezékként is használatos. A kurkuma fő bioaktív komponensei a kurkuminoidok, melyek közül a legfontosabb a kurkumin. Első szintetikus előállítását követően a kurkumin számos tudományos kutatás témáját képezte az elmúlt évszázad során. A kurkumin, valamint a különböző kurkumin-származékok általánosan acetyl-aceton és egy aromás benzaldehid reakciójával állíthatók elő bóroxid, egy trialkil-borát és egy primer amin jelenlétében [1]. Több próbálkozás is volt a bóroxid helyettesítésére a szintézisben. Ily módon előállítottak kurkuminoidokat olyan anyagokat használva, mint a bór-trifluorid [2] vagy bórsav [3] jó vagy kiváló hozammal. Ami a fotofizikai tulajdonságokat illeti, a kurkuminoidok esetében ezek erősen függnak az oldószer polaritásától, az aromás gyűrűkön jelenlévő szubsztituensektől, valamint a fémtől fémkomplexek esetén [4]. Az alábbi tanulmány a kurkumin származékok előállításával és szerkezeti analizisével foglalkozik, fő célja az említett vegyületek fotofizikai jellemzése.

Kulcsszavak: kurkuminoidok, szintézis, fotofizikai tulajdonságok, szerkezet-felderítés

- [1] H. J. Pabon, *Recl. Trav. Chim. Pays-Bas*, **1964**, 83, 379–386.
- [2] E. Venkata Rao, P. Sudheer *Indian J Pharm Sci.*, **2011**, 73(3), 262–270.
- [3] D. Pore, R. Alli, A. S. C. Prabhakar, R. R. Alavala, U. Kulandaivelu, S. Boyapati, *Letters in Organic Chemistry*, **2012**, 9(5), 447–450.
- [4] A. Barik, K. I. Priyadarsini, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **2013**, 105, 267–272.

McMurry-reakció funkciós csoport toleranciájának vizsgálata szelektíven továbbalakítható Tamoxifen analógok szintézisén keresztül

Investigation of Functional Group Tolerance of McMurry-Reaction Through Synthesis of Tamoxifen Analogs that Can Selectively Modified

DURÓ Cintia¹, JERNEI Tamás¹, CSÁMPAI Antal¹DSc

¹Kémia Intézet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

ABSTRACT

Tamoxifen is one of the most commonly used drug for prevention and medication of any stage of ER-positive breast cancer especially in postmenopause women. Its effect and side effects are caused by its Selective Estrogen Receptor Modulator (SERM) property. These side effects can be eliminated by conjugating Tamoxifen analogs to directing molecules e.g. peptides through a functional group which can be selectively modified. During my work, I have investigated the effects of these functional groups on the McMurry-reaction as a result it was observable its functional groups variable tolerance.

ÖSSZEFOGLALÓ

A Tamoxifen napjainkban az egyik leggyakrabban használt gyógyszerhatóanyag bármely stádiumban lévő ER-pozitív emlődaganat megelőzésére és kezelésére, leginkább menopauza utáni nők esetében. Hatását és mellékhatásait elsősorban Szelektív Ösztrogén Receptor Modulátor (SERM) voltának köszönheti. Ezen mellékhatások kiküszöbölhetők azáltal, ha irányító molekulákhoz, például peptidekhez konjugáljuk őket, egy szelektíven továbbalakítható funkciós csoporton keresztül. Munkám során, ezeknek a funkciós csoportoknak a McMurry-reakcióra való hatását vizsgáltam, amely eredményekért megfigyelhető volt ezen funkciós csoportok változatos toleranciája.

Kulcsszavak: Tamoxifen, daganatellenes hatás, McMurry, SERM, funkciós csoport tolerancia

Referenciák:

Dhingra, K., 1999., *Invest. New Drug.*, 17, 3, 285-311.

Ephritikhine, M., 1998, *Chem. Commun.*, 23, 2549-2554.

Réz(I)oxid-nemesfém rendszerek előállítása és jellemzése

Synthesis and Characterization of Copper(I)oxide-noble Metal Systems

DUSNOKI Daniella^{1,*}, FODOR Szilvia^{1,2,*}, PAP Zsolt^{2,3}, HERNÁDI Klára¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete,
Treboniu Laurian 42, Kolozsvár, RO-400271

³ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Környezettudományi és Műszaki Intézet, Tisza Lajos körút 103, Szeged, HU-6720

*d.daniella@citromail.hu

ABSTRACT

Copper (I) oxide - noble metal composites are potential nanomaterials for water purification under visible light irradiation. The primary aim of the present work was the synthesis and characterization of Cu₂O-Pd or Cu₂O-Pt nanocomposites. The first step was the synthesis of Cu₂O microcubes, followed by the deposition of the noble metal nanoparticles on the copper(I)oxide's surface. The second step was the morphological and structural characterization of the composite systems. The morphological properties of the Cu₂O were examined using scanning electron microscopy (SEM), the presence of the noble metal nanoparticles was proven by transmission electron microscopy (TEM), while X-ray diffraction (XRD) was applied to study of the crystal structure of the materials. The photocatalytic activity was investigated by the degradation of methyl orange under visible light.

Keywords: copper(I)oxide, composite, noble metal nanoparticles, photocatalysis

ÖSSZEFOGLALÓ

A réz(I)oxid-nemesfém kompozitok felhasználásával lehetőségünk nyílik látható fényben történő fotokatalitikus víztisztításra. Jelen munka során két lépésben állítottunk elő kompozit rendszereket. Először réz(I)oxid mikrokockákat előállítottunk elő, majd nemesfém nanorészecskék választottunk rá a félvezető felületére. A kutatás második lépése a kompozit rendszerek anyagszerkezeti jellemzése volt. Pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM) a réz(I)oxid mikrorészecskék morfológiáját vizsgáltuk, transzmissziós elektronmikroszkópiás vizsgélatokkal (TEM) bizonyítottuk a nemesfém nanorészecskék jelenlétét, majd röntgendiffrakciós módszerrel (XRD) tanulmányoztuk a szerkezeti és összetételbeli tulajdonságait az előállított kompozitoknak. Ezen ismereteinket a későbbiekben szeretnénk felhasználni a kompozitok tesztelésénél modell szennyezőkkel történő fotokatalitikus tesztekben.

Kulcsszavak: réz(I)oxid, kompozit, nemesfém nanorészecskék, fotokatalízis

Fenilalanin ammónia liázok termostabilitásának növelése fehérjemérnökség által

Enhancing the Thermostability of Phenylalanine Ammonia Lyases Through Protein Engineering

HORVÁTH Ilka¹, Raluca TOMOAGA¹, Diana TORK SOUAD¹,
Dr. NAGY Csaba Levente¹, Dr. BENCZE László Csaba¹

¹Biokatalízis és Biotranszformációk Kutatóközpont, Kémia és Vegyészmérnöki kar,
Babeş-Bolyai Tudományegyetem,
Arany János utca 11, RO-400028 Kolozsvár, tel. 40-264-591998, fax: 40-264-590818
e-mail: horvath_ilka@yahoo.com; csibencze@chem.ubbcluj.ro, web:
<http://www.chem.ubbcluj.ro/~csibencze>

ABSTRACT

Phenylalanine ammonia-lyases are catalyzing the transformation of the L-phenylalanine into *trans*-cinnamic acid, through elimination of ammonia. These enzymes possess a broad substrate range and also catalyze with high efficiency the reverse, ammonia addition reaction producing L-amino acids from achiral acrylic acid substrates. Accordingly there is an enhanced interest towards their industrial (synthesis of optically pure intermediates) and clinical (in the treatment of phenylketonuria) applications. Currently their low temperature and protease stability of the enzymes are the major challenges to be solved.

During our research we aimed to enhance the stability of phenylalanine ammonia lyase from parsley (*Petroselinum crispum*) (PcPAL) through protein engineering. Using the crystal structure of the enzyme, we identified the most flexible amino acids (with the highest B-factor) located on the surface of structure and they were replaced to all the other natural amino acids using the iterative saturation mutagenesis methodology. The thermostability examination of the obtained mutant library was performed through the novel high-throughput activity assay developed by us. The development of this activity assay was crucial to carry out the high-throughput activity screening of the whole-cell mutant libraries, containing a large number of mutant clones.

ÖSSZEFOGLALÓ

A fenilalanin-ammónia liázok természetes reakciója az L-fenilalanin *transz*-fahéjsavvá való átalakulása ammónia elimináció útján. Ezen enzimek viszonylag széles szubsztráttartománnyal rendelkeznek, ugyanakkor a fordított ammónia addíciós reakciót is kiváló hatékonysággal katalizálják. Ennek köszönhetően ipari valamint a fenilketonúria kezelésében történő felhasználása iránti érdeklődés nagyfokú, melyet azonban alacsony hő- valamint proteáz enzimek hasítása elleni stabilitásuk árnyékol.

Kutatásunk során a petrezselyemből (*Petroselinum crispum*) származó fenilalanin ammónia liáz (PcPAL) stabilitásának növelését vizsgáltuk fehérjemérnökség útján. Azonosítva az enzim kristályszerkezetéből a felszínén levő legflexibilisebb (legmagasabb B-faktossal rendelkező) aminosavakat, elvégeztük ezek mutációját az összes többi természetes aminosavra, alkalmazva a telített mutagenézis módszertanát. A kapott mutáns állomány termostabilitásának vizsgálatát az általunk kifejlesztett aktivitás mérési módszerrel végeztük el. Ezen aktivitás esszé kifejlesztése kulcsfontosságúnak bizonyult, megengedve az egész sejtes mutáns állomány enzimaktivitásának magas hatékonyságú (high-throughput) vizsgálatát.

Kulcsszavak: PcPAL, termostabilitás, telített mutagenézis módszertana, magas hatékonyságú enzimaktivitás mérés, mutáns állomány

Új típusú β -karbolinok és ferrocén analógok szintézise

Synthesis of New Types of β -carbolines and Ferrocene Analogues

HUTAI Dániel, FODOR Kinga Judit, CSÁMPAI Antal DSc

Eötvös Lóránd Tudományegyetem Természettudományi Kar

Magyarország, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/a

Telefon: (36-1) 372-2545

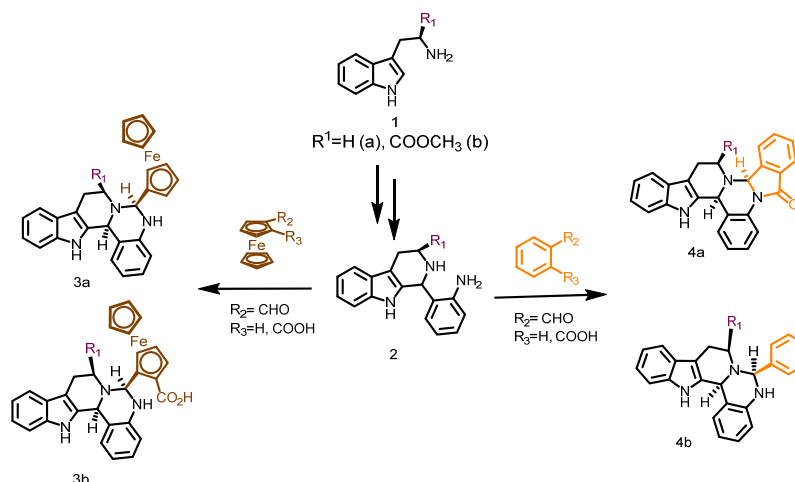
E-mail: dh@ttk.elte.hu, Honlap: ttk.elte.hu

ABSTRACT

Nowadays β -carboline analogues have shown outstanding cytotoxic activity against several human cell lines and its effect on the central nervous system is also great. In our project, from tryptophane-methyl-ester (**1b**) and triptamine (**1a**) we synthesised biologically interesting, new polycondensed β -carbolines and its ferrocene analogues (**3-a,b** and **4-a,b**). Introducing a ferrocene-unit can greatly increase the biological activity of molecules which can result in more active ingredients.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az utóbbi időben a β -karbolin analóg vegyületek kiemelkedő citotoxikus aktivitást mutatnak számos humán tumorsejtvonal ellen emellett a központi idegrendszerre gyakorolt hatása sem elhanyagolható. Munkánk során megvalósítottuk triptofán-metilészterből (**1b**) illetve triptaminból (**1a**) kiindulva biológiai szempontból érdeklődésre számot tartó új, polikondenzált, β -karbolinok és ferrocént tartalmazó analógjaik szintézisét (**3-a,b** és **4-a,b**). A ferrocén-egység bevezetése nagymértékben növelni tudja a molekulák biológiai aktivitását, még hatékonyabb hatóanyag molekulát eredményezhet.



Kulcsszavak: citotoxicitás, tumor, idegrendszer, triptofán, triptamin, β -karbolin, ferrocén

Hivatkozások:

- [1.] Ishida, J.; Wang, H. –K.; Bastow, K. F.; Hu, C. –Q.; Lee, K. –H. Bioorg. Med. Chem. Lett., 1999, 9, 3319.
- [2.] Jiang, W.; Charlet-Fagnere, C.; Sapi, J.; Laronze, J. –Y.; Renard, P.; Pfeiffer, B.; Leonce, S. J. Enzyme. Inhib. Med. Chem., 2002, 17, 369.
- [3.] Jiang, W.; Wen, R.; Laronze, J. –Y. J. Chin. Pharm. Sci., 1999, 8, 177.

Paramagnetizmus metálkarboránokban: poliéderez kromadikarborán rendszerek

Paramagnetism in Metallocarboranes: The Polyhedral Chromadiboraborane Systems

JÁKÓ Szabolcs¹, KUN Attila-Zsolt^{1*}, Alexandru LUPAN^{1*}, R. Bruce KING^{2*}

¹Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Babeş–Bolyai Tudományegyetem,
Kolozsvár, Arany Janos utca, 11 szám, postakód 400028,

tel.: 40-264-591998, fax: 40-264-590818 e-mail: jakoszabi@gmail.com

²Center of Computational Quantum Chemistry, The University of Georgia, Athens, GA, United States

ABSTRACT

The chromadiboraboranes $\text{CpCrC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ ($8 \leq n \leq 12$) are of interest in providing stable paramagnetic metallocarboranes, among which the 12-vertex $\text{CpCrC}_2\text{B}_9\text{H}_{11}$ structure has been synthesized by Hawthorne and co-workers [1].

Density functional theory is showing that the lowest-energy systems are quartet spin-state structures. Higher energy $\text{CpCrC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ ($8 \leq n \leq 11$) deltahedra are doublet spin-states, exhibiting *isocloso* geometry.

All of the lowest-energy $\text{CpCrC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ ($8 \leq n \leq 11$) polyhedra, have both carbon atoms at a degree 4 vertex.

In all of the $\text{CpCrC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ ($8 \leq n \leq 12$) deltahedra, the lowest-energy structures are those with the highest number of Cr-C edges, in contrast to the $\text{CpCoC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ systems in which they are higher in energy.

Keywords: Chromadiboraboranes, Density functional theory, lowest-energy structure.

ÖSSZEFOGLALÓ

A $\text{CpCrC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ ($8 \leq n \leq 12$), kromadikarborán struktúrák stabil paramágneses metálboránok, melyek közül a 12-csúcsú $\text{CpCrC}_2\text{B}_9\text{H}_{11}$ molekulát sikerült Hawthorne és munkatársainak előállítani [1].

Sűrűség-funkcionál elmélet alkalmazása kimutatta, hogy a legalacsonyabb-energiával rendelkező poliéderek kvartett spinnel-, míg a nagyobb energiájú $\text{CpCrC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ ($8 \leq n \leq 11$) deltaéderek dublett spinnel rendelkeznek és geometriájuk pedig izoklozo.

Az összes alacsony-energiájú $\text{CpCrC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ ($8 \leq n \leq 11$) klaszterben mindkét szén atom 4-él számú csúcsban található.

A legalacsonyabb-energiájú deltaéderek rendelkeznek a legtöbb Cr-C éllel, ellentétben a $\text{CpCoC}_2\text{B}_{n-3}\text{H}_{n-1}$ deltaéderekkel, ahol ezen struktúrák energiája nagy.

Literature:

[1] K. P. Callahan, M. F. Hawthorne, *Adv. Organomet. Chem.* **1976**, *14*, 145–186.

CRP assay fejlesztése papír hordozón

Developing Paper Based CRP Assay

JURÁNYI E. Petra¹, Dr. BERÉNYI Szilvia¹, Dr. GYURCSÁNYI Róbert¹

¹ BME Lendület Kémiai Nanoérzékelők Kutatócsoport,
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111, Budapest, Szt. Gellért tér 4.
juranyi.e.petra@gmail.com; <http://biochemsens.bme.hu/>

ABSTRACT

CRP (C-reactive protein) is a significant diagnostic marker. Its increased concentration in blood may indicate a bacterial infection, and/or an acute inflammation in the body. Thereby a cheap, disposable 'point-of-care' diagnostic device could be extremely useful in support of a therapeutic decision. In this work, a fluorescent labeled, paper-based protein assay was developed for the high-sensitivity detection of CRP. The pre-experiment and optimization steps were performed.

ÖSSZEFOGLALÓ

A CRP (C-reactive protein) jelentős diagnosztikai marker, emelkedett vérbeli koncentrációja utalhat bakteriális fertőzésre, és/vagy akut gyulladásra a szervezetben. Egy, akár a háziorvosi rendelőben is elvégezhető diagnosztikai teszt rendkívül hasznos lehet a terápiás döntések támogatásában. Kutatásom során egy fluoreszcens jelölésű fehérje assay-t fejlesztettem papír hordozón CRP nagy érzékenységű kimutatására. és az ehhez szükséges előkísérleteket, és optimalizálási lépéseket végeztem el.

Olajemulziók membránszűrése TiO₂/szén-nanocső kompozittal módosított fotokatalitikus membránokkal

Membrane Filtration of Oil-in-water Emulsions with TiO₂/carbon Nanotube Modified Photocatalytic Membranes

KÁLMÁN Viktória¹, Dr. KERTÉSZ Szabolcs¹, Dr. BESZÉDES Sándor¹,
Dr. PAP Zsolt², GYULAVÁRI Tamás², Prof. Dr. HODÚR Cecília^{1,2},
Dr. LÁSZLÓ Zsuzsanna^{1,*}, Dr. VERÉB Gábor^{1,*}

¹Szegedi Tudományegyetem, Mérnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézet,
H-6725, Szeged, Moszkvai krt. 9. (Tel.:06-62-546558; <http://www.mk.u-szeged.hu>)
²Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet, H-6720, Szeged,
Tisza Lajos krt. 103. (Tel: 62/546-940; <http://www2.sci.u-szeged.hu/kti/index/index.php>)
E-mail: *verebg@mk.u-szeged, zsizsu@mk.u-szeged.hu

ABSTRACT

In the present study TiO₂/CNT nanocomposites were used to modify the surface of ultrafilter membranes, which were used to purify oil-in-water emulsions. Achievable fluxes, reversible- and irreversible filtration resistances, fouling mechanisms and photocatalytic activities were compared in case of solely TiO₂, CNT-, TiO₂/CNT composite covered and not modified membranes. Solely TiO₂ and CNT coatings resulted in significant reduction of total filtration resistance but TiO₂/CNT composite coating resulted far the highest flux. The composite also proved to have increased photocatalytic activity, which is beneficial during the regeneration of the membrane.

Keywords: oil-in-water emulsion, membrane filtration, photocatalyst, TiO₂, CNT

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen tanulmányban TiO₂/CNT nanokompozitokat alkalmaztunk ultraszűrő membránok felületmódosítására, melyeket olajemulziók tisztítására alkalmaztunk. Összehasonlítottuk az elérhető fluxusokat, a reverzibilis és az irreverzibilis szűrési ellenállásokat, az eltömődési mechanizmusokat és a fotokatalitikus aktivitásokat „csak” TiO₂-dal vagy CNT-vel, illetve TiO₂/CNT nanokompozittal borított, valamint nem módosított membránok esetében. A TiO₂ és a CNT bevonatok önmagukban is jelentősen csökkentették a teljes szűrési ellenállás értékét, de a TiO₂/CNT kompozit bevonat eredményezte messze a legmagasabb fluxust. Ezen felül a kompozit fotokatalitikus aktivitása is igazolhatóan megemelkedett, ami a membránok regenerálása során előnyös.

Kulcsszavak: olajemulzió, membránszűrés, fotokatalizátor, TiO₂, CNT

Köszönetnyilvánítás: A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (Magyar Tudományos Akadémia) és az Új Nemzeti Kiválóság Program (Emberi erőforrások Minisztériuma; pályázati azonosító: ÚNKP-18-4-SZTE-78) támogatásával készült. A szerzők hálását továbbá a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal által (NKFI-K-112096; 2017-2.3.7-TÉT-IN-2017-00016), illetve az Emberi Erőforrás Fejlesztési Operatív Program (EFOP-3.6.2-16-2017-00010, RING-2017) által nyújtott anyagi támogatásokért is.

AgBr fotokatalizátorok alkalmazhatósága és szerkezetének befolyásolása

Applicability and Structure Modification of AgBr Photocatalysts

KISS János¹, TÓTH Zsejke-Réka^{1,2}, PAP Zsolt^{2,3}, HERNÁDI Klára¹, KOVÁCS Gábor^{1,3}

¹ Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatika Kar,
Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete,
Treboniu Laurian 42, Kolozsvár, RO-400271

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezettudományi és Műszaki Intézet,
Környezetkémiai Kutatócsoport, Tisza Lajos krt. 130, Szeged, HU-6720

ABSTRACT

One of the most significant environmental problem of the modern society is the decrease of drinking water sources. The available water purification methods are not suitable for removing all contaminants. As a solution for this problem, heterogenous photocatalysis can be used. The present research deals with the applicability of AgBr photocatalysts and connection between the catalyst's morphology and structure.

In order to modify the structure of the catalysts it was used surfactants with different structure parameters, and by optimization of the amount of the surfactant. For the morpho-structural characterization of the catalysts, transmission and scanning electron microscopy, X-ray diffractometry and diffuse reflectance spectroscopy was used. For the investigation of photocatalytic activity methyl orange degradation was evaluated under visible light.

Keywords: photocatalysis, silver-bromide, visible light, model pollutant, water treatment

ÖSSZEFOGLALÓ

A modern társadalom egyik legjelentősebb környezeti problémája az egyre növekvő népesség ivóvíz igényének kielégítése, emberi fogyasztásra alkalmas tiszta ivóvízzel. A jelenleg elérhető vízkezelési módszerek nem alkalmasak minden szennyezés eltávolítására. Erre a problémára jelenthet alternatív megoldást a heterogén fotokatalízis. Jelen kutatás az AgBr fotokatalizátorok ilyen jellegű alkalmazhatóságának, valamint szerkezetük és morfológiájuk befolyásolásával foglalkozik.

A katalizátorok előállítása során célul tűztük ki a kialakuló szerkezet változtatását eltérő szerkezeti jellemű alakformáló ágens használatával, valamint a hozzáadott alakformáló ágens mennyiségének optimalizálását. Szerkezeti és morfológiai tulajdonságaik vizsgálatára transzmissziós- és pásztázó elektronmikroszkópiás, röntgen diffrakciós, valamint diffúz reflexiós spektrometriás méréseket végeztünk. Fotokatalitikus aktivitásuk vizsgálatára modell szennyező (metilnarancs) bontását végeztük látható fénnel történő megvilágítás mellett.

Kulcsszavak: fotokatalízis, ezüst-bromid, látható fény, modellszennyező, vízkezelés

Mutáns specifikus KRAS G12C inhibitorok tesztelése

Testing of Mutant Specific KRAS G12C Inhibitors

KOPPÁNY Gergely^{1,2}, NYÍRI Kinga^{1,2}

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyész és Biomérnöki Kar,
Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszerudományi Tanszék,
1111, Budapest, Műegyetem rkp. 3, +36 1 463-1110, www.bme.hu

²Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont, Enzimológiai Intézet,
1117, Magyar tudósok körútja 2, +36 1 382 6200, www.ttk.mta.hu

ABSTRACT

KRAS is one of the most frequent oncogenes, responsible for about 20 percent of all human cancers. Recently, new type of inhibitors targeting the G12C mutant of KRAS were developed, which bind covalently to the mutant residue. We adapted the pioneering fragment based approach for development of new inhibitors against this target. A high-throughput screen cascade for testing the reactivity and functional effect of fragments was established in our laboratory. Now we aim to develop effective inhibitors by increasing the size of the fragment hits from these screens.

ÖSSZEFOGLALÓ

A KRAS a legelterjedtebb onkogén fehérjék egyike, mutációja a rákos megbetegedések közel 20 százalékáért felelős. A közelmúltban olyan inhibitorok fejlesztése került a kutatások fókuszába, amelyek a KRAS fehérje G12C mutánsát célozzák meg, kovalens kötést létesíve a mutáns aminosavval. Kutatócsoportunk a nemkovalens inhibitorok esetén alkalmazott fragmens alapú gyógyszerfejlesztési megközelítést adaptálta erre a célpontra. Kifejlesztettünk egy olyan nagy áteresztőképességű tesztrendszert, amely alkalmas arra, hogy vizsgáljuk az fragmensek célfehérjéhez való kötődését, és a fehérje aktivitásra kifejtett hatásukat. Ezt követően a szűrővizsgálatok során kapott megfelelő reaktivitású jelöltek molekulaméretének növelésével tervezünk hatékony inhibitorokat előállítani.

Kulcsszavak: KRAS, onkogén, gyógyszerfejlesztés, kovalens inhibitor, nagy áteresztőképességű szűrővizsgálat

**Vörösiszap szennyezés remediációjának
leírása mesterséges neurális hálózatok által.
Fitoremediációs esettanulmány vizes környezetben**

**Description of Red Mud Polluted Site Remediation
by Means of Artificial Neural Networks.
A Case Study for Aqueous Phytoremediation**

MIHÁLY Norbert-Botond¹, Dr. CSAVDÁRI Alexandra¹, Dr. CRISTEA Vasile-Mircea¹

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem,
RO-400028 Kolozsvár, Arany János utca 11,
Tel.: +40 264 593 833, www.chem.ubbcluj.ro;
e-mail: acsavdari@chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

Dynamic behaviour of non-linear processes is often described by means Artificial Neural Networks (ANNs). Data from three different sets of experiments were used. Each involved the phytoremediation of a laboratory scale red mud polluted aqueous site. The developed networks simulate the lowering of pH during time, and were used to assess as well as to compare the remediation efficiency of *Salvinia natans*, *Eichhornia crassipes* and *Pistia stratiotes*.

Key-words: Artificial Neural Network, Red mud, pH value, Phytoremediation

ÖSSZEFOGLALÓ

Nem lineáris folyamatok viselkedését sokszor Mesterséges Neurális Hálózatok (MNH) segítségével írják le. Alapul szolgált három különböző kísérleti sorozat. Mindegyik magába foglalta egy laboratórium méretű vörösiszappal szennyezett vizes rendszer fitoremediációját. Ezek alapján kidolgozott hálózatok képesek a pH időbeli csökkenését előrejelezni, felhasználtuk a remediációs hatékonyság felmérésére és ezek összehasonlítására a *Salvinia natans*, *Eichhornia crassipes* and *Pistia stratiotes* növények esetében.

Kulcsszavak: Mesterséges Neurális hálózatok, Vörösiszap, pH érték, Fitoremediáció

Potenciális melanoma-ellenes, 1,2,5-oxadiazol-típusú hatóanyagjelöltek szintézise

Synthesis of Potential Anti-melanoma, 1,2,5-oxadiazole-type Agents

RAGÁNYI László¹, CSÁMPAI Antal DSc¹

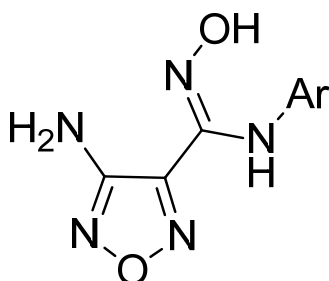
¹Kémia Intézet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

ABSTRACT

Indoleamine 2,3-dioxygenase (IDO) enzyme has been proved to be responsible to inhibit the immune response to tumor cells in case several tumor types. In many cases 1,2,5-oxadiazole has been found to have an IDO inhibitor effect and can therefore be effectively used to treat various types of cancer [1]. The aim of my research was to expand the family of previously synthesized 1,2,5-oxadiazoles by changing the aromatic substituent, which resulted 7 new oxadiazole derivatives.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az indolamin-2,3-dioxigenáz (IDO) enzimről számos daganattípus esetében bizonyították, hogy gátolja a tumorsejtekkel szembeni immunválasz kialakulását. Az 1,2,5-oxadiazol származékoknál több esetben tapasztaltak IDO-inhibitor hatást, ezáltal hatékonyan alkalmazhatók különböző ráktípusok kezelésére [1]. Kutatásom célja a korábban szintetizált 1,2,5-oxadiazolok családjának kibővítése volt az aromás szubsztituens változtatása révén, ami során 7 új oxadiazol származékot sikerült szintetizálnom.



Kulcsszavak: oxadiazolok, IDO, immunválasz, tumorsejt, aromás aminok

Referenciák:

[1] Uyttenhove, C.; Pilotte, L.; et al.; *Nature Medicine*, **2009**, 9, 1269-1274

MoO₃ hatása az AgBr, BiOI, Cu₂O és ZnO fotokatalizátorok aktivitására

Effect of MoO₃ on the Activity of AgBr, BiOI, Cu₂O and ZnO Photocatalysts

RAVASZ Alpár^{1#}, KEDVES Endre-Zsolt^{2,3}, TÓTH Zsejke-Réka^{3,4}, BÁRDOS Enikő⁴, FODOR Szilvia⁴, KOVÁCS Zoltán^{2,3,4}, PAP Zsolt^{3,5}, HERNÁDI Klára⁴, Lucian BAIA^{2,3}

¹ BBTE, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Arany János utca 11, Kolozsvár, RO-400028

² BBTE, Fizika Kar, Mihail Kogălniceanu 1, Kolozsvár; RO-400084

³ BBTE, Nanustruktúrált Anyagok és Bio-Nano felületek Központja, Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Kutatóintézete, Treboniu Laurian 42, Kolozsvár, RO-400271

⁴ SZTE, Természettudományi és Informatika Kar, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720

⁵ SZTE, Környezettudományi és Műszaki Intézet, Tisza Lajos krt. 130, Szeged, HU-6720
#ravaszalpar95@gmail.com

ABSTRACT

The human activities are source of danger for our planet's water resources, thus the advanced oxidation processes, especially the heterogeneous photocatalysis can be a feasible solution to resolve the problem of water pollution. Binary composites were prepared with *in situ* method, in the presence of MoO₃, four different photocatalysts (AgBr, BiOI, Cu₂O, ZnO) were crystallized using hydrothermal method, containing 10% MoO₃ (wt%). The structural, morphological and optical properties of the prepared materials and composites were successfully characterized using SEM, XRD, and DRS. The composites applicability as a photocatalyst were tested for the degradation of two different organic pollutants (methyl orange and phenol) under UV and visible light irradiation.

Keywords: MoO₃, *in situ*, hydrothermal method, composites, photocatalytic activity

ÖSSZEFOGLALÓ

Az emberi tevékenységek gyakran jelentős veszélyforrást jelentenek Földünk vízkészleteire. A víz-szennyezés problémájára megoldást jelenthet a nagyhatékonyságú oxidációs eljárások egyike, a heterogén fotokatalízis. Kutatásaink során bináris kompozitrendszereket állítottunk elő *in situ* módszerrel, ahol MoO₃ jelenlétében négy különböző fotokatalizátort (AgBr, BiOI, Cu₂O, ZnO) kristályosítottunk ki hidrotermális eljárást alkalmazva. A bináris kompozitok 10 tömegszázalék MoO₃-ot tartalmaztak az alapkatalizátor mellett. Az előállított anyagokat és kompozitokat szerkezetileg, morfológiailag és optikailag sikeresen jellemeztük különböző mérés technikákkal (SEM, XRD, és DRS). A kompozitok alkalmazhatóságát mint fotokatalizátor, két különböző modellszennyezővel szemben vizsgáltuk (metil narancs, fenol) UV és látható megvilágítás alatt.

Kulcsszavak: MoO₃, *in situ*, hidrotermális eljárás, kompozit, fotokatalitikus aktivitás

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönik az anyagi támogatást a PN-III-P1-1.1-TE-2016-1588 jelű pályázatnak. Ravasz Alpár köszönetét szeretné kifejezni a Balassi Intézet Márton Áron Tehetséggondozó Programján keresztül kapott anyagi támogatásért.

NIR fluoreszcens jelzővegyületek előállítása és fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata

Synthesis and Photophysical Properties of NIR Fluorescent Dyes

SISA Rihárd, GÁL Emese, BRÉM Balázs

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Arany János utca 11,
Kolozsvár, Románia, e-mail: rihardsisa@gmail.com

ABSTRACT

Cyanine dyes are fluorescent molecules that consist of two nitrogen heterocyclic centers, functioning both as electron acceptors and donors which are connected by either a mono- or polymethine chain. The conjugation of π -electrons are distributed between the electron donor and acceptor groups resulting a delocalized cationic charge across the polymethine bridge [1]. The photophysical properties of these dyes can be modified by: altering the polymethine chain length or incorporating terminal substituents with electron-donating or electron-accepting capabilities [2]. A series of hepta-, penta-, and dimethine cyanine dyes were synthesized by condensation of 2,3,3-trimethyl indolenium salts with reactive intermediates. The structures and the photophysical properties of these dyes were characterized by NMR (1D, 2D, homo- and heteronuclear), HRMS and UV-Vis, FL measurements.

ÖSSZEFOGLALÓ

A cianin festékek olyan fluoreszcens molekulák, melyekben két nitrogén tartalmú heterociklusos vegyületet egy kiterjedt konjugácójú mono- vagy polimetilén lánc köt össze. A nitrogén atom miatt a heterociklusos vegyületek elektron donor és akceptorként is viselkedhetnek, melyek között megvalósulhat a π elektronok konjugációja, létrehozva ezáltal egy delokalizált pozitív töltést a telítetlen szénhidrogén „hídon” [1]. Ezen festékek fotofizikai tulajdonságai módosíthatóak: a polimetilén lánc hosszának növelésével, valamint elektron szívó vagy taszító csoportokkal való funkcionizálással [2]. 2,3,3-trimetil indolium jodid és megfelelő reagensekkel való kondenzációs reakciója során, egy sorozat hepta- penta-, és dimetin cianin festéket állítottunk elő. Ezen molekulák szerkezeti és optikai tulajdonságait NMR (1D, 2D, homo- és heteronukleáris), HRMS és UV-Vis, FL mérésekkel vizsgáltuk.

Kulcsszavak: cianin festékek, kiterjedt π konjugáció, szerkezetvizsgálat, fluoreszcens molekulák, fotofizikai tulajdonságok.

[1] G. Patonay, J. Salon, J. Sowell, L. Strekowski, *Molecules* **2004**, 9, 40-49.

[2] O. V. Przhonska, H. Hu, S. Webster, J. L. Bricks, A. A. Viniychuk, A. D. Kachkovski, Y. L. Slominsky, *Chemical Physics* **2012**, 411, 17-25.

Grafén alapú tervezérlésű tranzisztor vizsgálata a p-n átmenet képzési folyamatában

Analysis of Electrical Characteristics for Graphene Field Effect Transistor with Graphene p-n Junction Formation Process

SZABÓ Róbert¹, SO-YOUNG Kim², JEON EUN Ki²,
JEONG GYEONG Jun², BYOUNG Hun Lee²

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Vegyészmérnöki szak, alapképzés, IV. év

²Gwangju Institute of Science and Technology,
SMSE, Exploratory Hybrid Electronic Device Laboratory

ABSTRACT

The graphene might be the key to improve our currently used electrical devices. This material could start a new era by leaving the silicone-based electronics behind. Earlier researches found out that graphene transistors have a huge potential for developing the electronic devices. Theoretically those devices could revolutionize the silicon based technology, but particularly the efficiency of different methods for achieving the p-n junction formation on the FET transistors are still unclear. (1) Our investigation had the purpose of finding and developing a fabrication method for formatting the p-n junction on the FET transistors.

Previous studies found out that the Polyethylenimine (PEI) and Polyacrylic acid (PAA) materials have leading properties in forming the p-n junction.

The aim of our experiment was to find the most efficient way of fabrication the FET.

ÖSSZEFOGLALÓ

A grafén kulcsszerepet kap az elektronikus eszközök fejlődésében. Ez egy új korszakot jelenthet a szilikon alapú elektronikus eszközöket helyettesítve. Korábbi kutatások fényt derítettek arra, hogy a grafén alapú tranzisztorok elméletileg feljavíthatják ezen eszközök minőségét, viszont gyakorlatban ennek a tranzisztornak az előállításának a folyamata még nem tisztázott. A kutatás célja egy FET (tervezérlésű) tranzisztor p-n átmenetének a gyártási folyamatának a kifejlesztése.

Kutatások kimutatták, hogy a PEI, polietilén imin és a PAA, poliakrilsav, megfelelő tulajdonságokkal rendelkezik a p-n átmenet felépítéséhez.

A kutatás célja a legalkalmasabb gyártási folyamat kifejlesztése.

Kulcsszavak: grafén, tranzisztor

Halogénezett aza-dipirrometén származékok előállítása és vizsgálata

Synthesis and Study of Some Halogenated Aza-dipyrromethene Derivatives

SZABÓ Yvette, Dr. LOVÁSZ Tamás

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Magyar Kémiai és Vegyészmérnöki Intézet,
Arany János utca 11 szám, 400028 Kolozsvár,
tel.: 40-264-591998, e-mail: szaboyvette17@gmail.com

ABSTRACT

Dipyrromethenes and aza-dipyrromethenes are pyrrole derivatives, used for the synthesis of chelate complexes with interesting optical properties. The BF_2 BODIPY and aza-BODIPY complexes have many applications in fluorescence imaging and optoelectronics.

The aim of our research was to obtain halogenated aza-dipyrromethenes. The new compounds were synthesized by Michael addition of nitromethane to 1,3-diaryl-propenones and subsequent cyclization reaction in the presence of ammonium acetate. The structure of the resulting compounds was confirmed by NMR and IR spectroscopic methods, and their optical properties were tested by UV-Vis and fluorescence spectroscopy.

ÖSSZEFOGLALÓ

A dipirrometének és aza-dipirrometének, érdekes optikai tulajdonságokkal rendelkező, kelát-komplexek kialakítására alkalmas pirrol származékok. A BF_2 -os BODIPY és aza-BODIPY komplexek számos alkalmazással rendelkeznek: a fluoreszcens képalkotás és az optoelektronika területén.

Kutatásunk célja halogénezett aza-dipirrometének előállítása volt. 1,3-Diaril-propenonokból kiindulva, nitrometán Michael-addíciójával és az ezt követő ammónium-acetát jelenlétében történő gyűrűzárási reakcióval, így a pirrol gyűrűk 2-es és 4-es helyzetében: fenil-, *para*-klór-fenil-, és fenotiazinil- csoportokat tartalmazó aza-dipirrometének képződtek. A keletkezett vegyületek szerkezetét: NMR és IR spektroszkópiás módszerekkel igazoltuk, valamint optikai tulajdonságaikat UV-Vis és fluoreszcencia spektroszkópiás mérésekkel vizsgáltuk.

Kulcsszavak: aza-dipirrometén, 1,3-diaril-propenon, gyűrűzárási reakció, szerkezetvizsgálat, optikai tulajdonságok

Hulladék polimerek alacsony hőmérsékletű termo-katalitikus hőbontása: a termékek in-situ minőségjavítása

Low Temperature Pyrolysis of Waste Polymers: In-situ Quality Improving of the Products

ZSINKA Viktória¹, FEKHAR Bahmed¹, MISKOLCZI Norbert¹

¹Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék,
Egyetem u. 10, Veszprém, Tel: +36 88 624-000, honlap: www.uni-pannon.hu

ABSTRACT

Products obtained by the waste polymer pyrolysis should be utilized as raw materials in chemical synthesis or can be used in refineries and petrochemical sector. On the other hand, the contaminants have a key role for the profitability of the processes. Whereas, undesired components from the raw materials transform to the products and deteriorate their long term properties. The main problems are the deterioration in corrosion, transportation and storage properties. In this work the low temperature pyrolysis of waste polymers was investigated in the presence of catalysts. Catalysts facilitate the isomerisation and aromatization reactions and increase the yields of volatiles. It was also concluded, that $\text{Ca}(\text{OH})_2$ containing catalysts can efficiently decrease the concentrations of contaminants.

Keywords: low-temperature cracking, zeolite catalyst, pollutant, isomeration, aromatisation

ÖSSZEFOGLALÓ

A polimer hulladékok hőbontásával nyert termékek többféle módon hasznosíthatók; kőolajfinomítói és petrokémiai alkalmazás, vagy akár kémiai szintézisek alapanyagaiként történő hasznosítás. Ugyanakkor a szennyezőanyagok kulcsfontosságúak a pirolízis üzemek hosszabb távon is nyereséges működéséhez. Az alapanyagok sajátosságai miatt ugyanis sok esetben nemkívánatos komponensek is keletkeznek, melyek a termékek rövid és hosszú távú tulajdonságait rontják. Elsősorban a kedvezőtlen korróziós jellemzők, illetve a szállítási és a tárolási tulajdonságok romlása jelent a legfőbb problémát. A kutatómunka során műanyag-hulladékok termo-katalitikus hőbontását vizsgáltuk alacsony hőmérsékleten, katalizátorok jelenlétében. A katalizátorok hatására izomerizációs és aromatizációs reakciók játszódtak le, illetve növekedett az illékonytermékek mennyisége. Megállapítottuk, hogy a $\text{Ca}(\text{OH})_2$ jelenléte a szintetikus zeolit katalizátor mellett a szennyezőanyagok csökkentése révén kedvezően befolyásolja azok hosszú távú alkalmazhatóságát.

Kulcsszavak: alacsony hőmérsékletű hőbontás, zeolit katalizátor, szennyezőanyag, izomerizáció, aromatizáció

MŰSZAKI SZEMLE

műszaki tudományos folyóirat

Kiadó: Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság – EMT Kolozsvár

Cím: 400604 Kolozsvár/Cluj, Románia, bd. 21 dec. 1989, nr. 116,

Tel./fax: +40-264-590825, e-mail: emt@emt.ro

<https://www.emt.ro/kiadvanyok/muszaki-szemle/archivum>

Megjelenés: 2 megjelenés évente, A4 formátumban, 40 oldal terjedelemben.

Alapítási év: 1997

Szerkesztőbizottság:

- Dr. Köllő Gábor főszerkesztő
(építéstudomány – RO),
Dr. Balázs L. György (építéstudomány – HU),
Dr. Bíró Károly-Ágoston
(energetika–elektrotechnika – RO),
Dr. Csibi Vencel-József (gépészet – RO),
Dr. Fedák László (építéstudomány – UA),
Dr. Kása Zoltán (számítástechnika – RO),
Dr. Kászonyi Gábor (építéstudomány – HU),
Dr. Majdik Kornélia (kémia – RO),
Dr. Nagy László (fizika – RO),
Dr. Peics Hajnalka (építéstudomány – SRB),
Dr. Puskás Ferenc (fizika – RO),
Dr. Sebestyén-Pál György (számítástechnika – RO),
Dr. Szalay György (gépészet – SK),
Dr. Turchányi Guy (építéstudomány – CH)
Dr. Zsuga Miklós (kémia – RO)



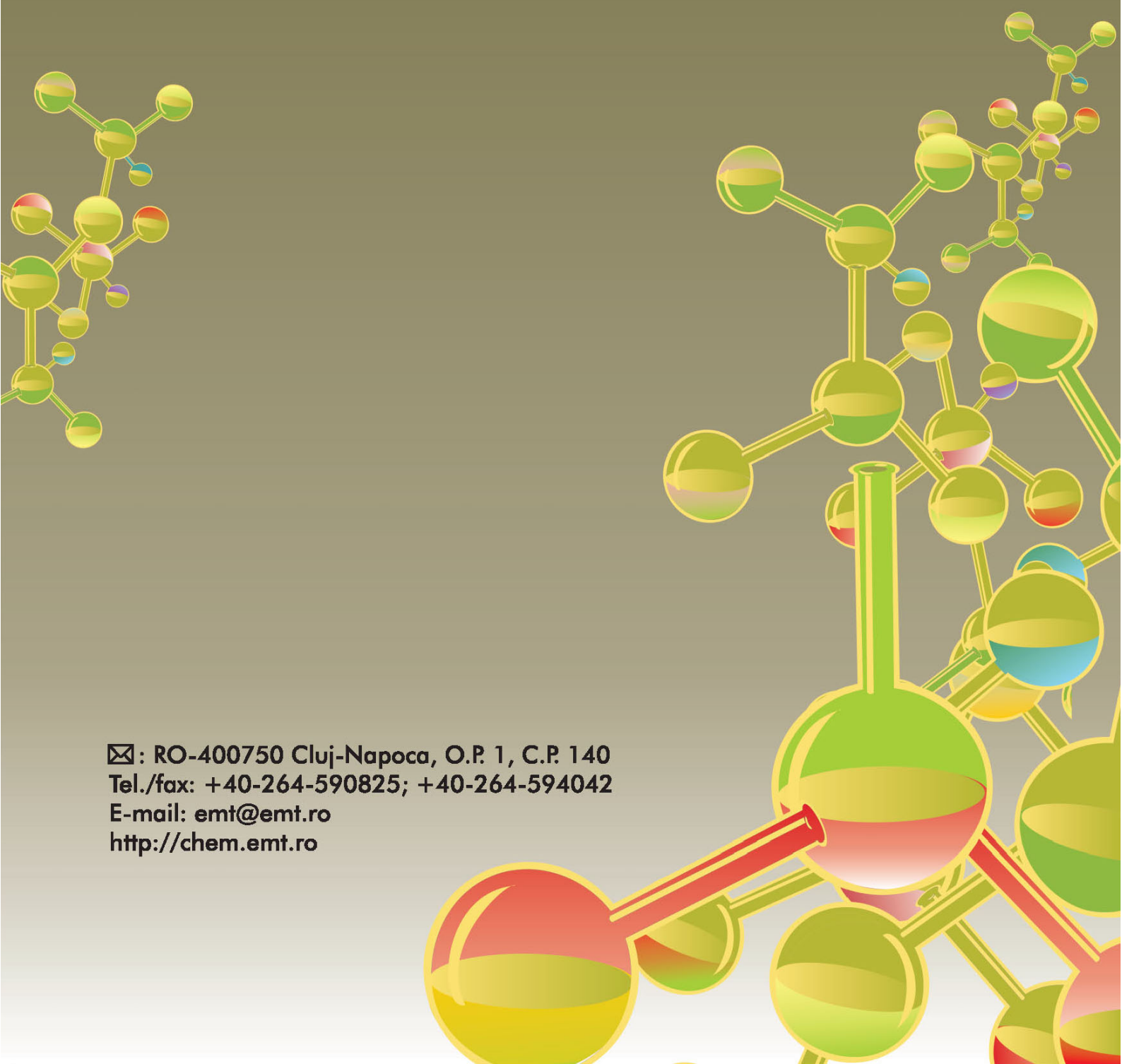
Kitűzött célok:

- magyar nyelvű műszaki és természettudományi folyóirat létrehozása Erdélyben
- közlési lehetőség biztosítása az erdélyi műszaki és természettudományi területen dolgozó szakemberek számára
- a magyar szaknyelv ápolása a műszaki és természettudományok területein



Jegyzetek

Jegyzetek



✉: RO-400750 Cluj-Napoca, O.P. 1, C.P. 140
Tel./fax: +40-264-590825; +40-264-594042
E-mail: emt@emt.ro
<http://chem.emt.ro>