

# Az Oláh György Doktori Iskola XI. Konferenciájának programja



**Időpont:** 2014. február 06. 8:00.

**Helyszín:** BME Ch épület, Szent Gellért tér 4., 205-ös terem.

**8<sup>00</sup>-8<sup>05</sup> Köszöntő**

## **Analitikai és fizikai kémia szekció**

**Elnök: Göröcs Noémi**

8<sup>05</sup>-8<sup>30</sup> Dorkó Zsannett, Verbić T., Horvai G.: Adszorpció molekuláris lenyomatú polimereken

8<sup>30</sup>-8<sup>55</sup> Holló Gábor: Hipójódossav szelektív mérése AgI és Pt elektróddal az oszcilláló Briggs-Rauscher reakcióban és alrendszeireiben

8<sup>55</sup>-9<sup>20</sup> Manek Enikő, Domján A., Madarász J., László K.: Poli(N-izopropilakrilamid) hidrogélek kölcsönhatásai környezetileg és orvosi biológiailag releváns kis aromás molekulákkal

9<sup>20</sup>-9<sup>45</sup> Bobály Balázs, Tóth E., Drahos L., Zsila F., Visy J., Vékey K., Fekete J.: Proteinek konformációja a fordított fázisú kromatográfiás rendszerben

**9<sup>45</sup>-10<sup>00</sup> Szünet**

## **Szerves kémia szekció I.**

**Elnök: Bagi Péter**

10<sup>00</sup>-10<sup>25</sup> Jablonkai Erzsébet, Keglevich Gy.: A mikrohullámú technika alkalmazásának lehetőségei katalitikus reakciókban

10<sup>25</sup>-10<sup>50</sup> Erdélyi Zsuzsa, Mátravölgyi B., Faigl F.: Fenilpirrol alapvázú organokatalizátorok szintézise és alkalmazása

10<sup>50</sup>-11<sup>15</sup> Fodor Anna, Magyar Á., Dr. Hell Z., Pirault-Roy L.: Heterogén kétfémes katalizátorok előállítása, felületi vizsgálata, alkalmazása szerves szintézisekben

11<sup>15</sup>-11<sup>40</sup> Szabó Tamás, Hirsch E., Tóth T., Huszthy P.: Enantiomertiszta, lipofil, diarilfoszfinsav egységet tartalmazó koronaéterek szintézise és szelektív transzportáló képességük vizsgálata

**11<sup>40</sup>-12<sup>45</sup> Ebédszünet**

## **Szerves kémia szekció II.**

**Elnök: Keglevich Péter**

12<sup>45</sup>-13<sup>10</sup> Ábrányi-Balogh Péter, Milen M., Mucsi Z., Keglevich Gy.: Új  $\beta$ -karbolin- és tienopiridin-származékok előállítása

13<sup>10</sup>-13<sup>35</sup> Deák Szilvia, Mátravölgyi B., Faigl F.: 1-fenilpirrol alapvázú aminoalkoholok előállítása és alkalmazása aszimmetrikus szintézisben

13<sup>35</sup>-14<sup>00</sup> Kókai Eszter, Farkas E., Boros Z., Nagy J., Kovács P., Hornyánszky G., Poppe L.: Szekunder alkoholok enzimatis elválasztása click-kémia segítségével

**14<sup>00</sup>-14<sup>15</sup> Szünet**

## **Biokémia szekció**

### **Elnök: Kiss Bernadett**

- 14<sup>15</sup>-14<sup>40</sup> Molnár M., Nagy Zs. M., Gruiz K., Fekete-Kertész Ildikó: Mikroszennyező anyagok környezettoxicológiai vizsgálata *Daphnia magna* szívritmus teszttel
- 14<sup>40</sup>-15<sup>05</sup> Balogh Gy. T., Müller Judit: Gyógyszerfelszívódási folyamatok modellezése *in vitro* penetrációs modellek segítségével
- 15<sup>05</sup>-15<sup>30</sup> Feigl V., Gruiz K., Klebercz O., Molnár M., Ujaczki Éva: Termesztőközeg kialakítását célzó kísérletek vörösiszappal keveredett talaj felhasználásával
- 15<sup>30</sup>-15<sup>55</sup> Kovács Annamária, Tömösközi S., Békés F., Láng L., Juhász A., Bedő Z.: A búza és spelta fehérjéinek molekuláris háttere és allergén karakterisztikája

### **16<sup>15</sup>-16<sup>35</sup> Díjak átadása, fórum**

### **16<sup>35</sup> Poszter szekció, fogadás**

## **A kiállított poszterek:**

1. Albert Emőke, Albouy P-A., Ayrál A., Csík G., Suhajda Á., Hórvölgyi Z.: Adalékolt TiO<sub>2</sub> bevonatok fotoaktivitása
2. Beke Dávid, Szekrényes Zs., Pálfi D., Róna G., Maák P., Kamarás K., Rózsa B., Buday L., Vértessy B. és Gali A.: Silicon carbide alapú festékpróbák
3. Bobály Balázs, Guillaume D., Fekete J., Fekete Sz.: Új, 2µm alatti szemcseátmérőjű, héjszerű töltetek összehasonlítása - Lehetőségek, korlátok
4. Firkala Tamás, Farkas A., Vajna B., Marosi Gy., Pokol Gy., Szilágyi I. M.: Felületerősített Raman térképezés alkalmazása tabletták hatóanyag tartalmának meghatározására
5. Hajas Livia, Török K., Bugyi Zs., Tömösközi S.: A búza genetikai és környezeti variabilitásának hatása az Elisa módszerrel történő sikértartalom meghatározásra
6. Török K., Hajas Livia, Bugyi Zs., Tömösközi S.: Reális mintamátrix alapú, több komponens tartalmazó referenciaanyag fejlesztése élelmiszerallergének meghatározásához
7. Polyák P., Hári József, Pukánszky B.: A halloysit nanocső mint funkcionális töltőanyag polimer nanokompozitokban
8. Holczbauer Tamás, Szabó M., Czugler M.: Drotaverin sók kristályos fázisának tervezése
9. Horváth Anna, Sipiczki M., Sveiczter Á.: A hasadó élesztő agn1p (endo- $\alpha$ -(1,3)-glükánáz) sejtseparációs fehérjéjének filogenetikai analízise
10. Horváth Zsuzsanna, Menyhárd A., Doshev P., Gahleitner M., Vörös Gy., Varga J., Pukánszky B.: A molekulaszervezet és a göcképzés hatása homo- és random polipropilén minták optikai tulajdonságára
11. Zsolt Kelemen, Hollóczki O., Péter-Szabó B., Székely E., Nagy J., Nyulászi L.: Imidazólium-actát ionos folyadékok – új lehetőségek
12. Bányai L., Kerekes Krisztina, Patthy L.: A wnt inhibitory factor-1 fehérje wif doménje wnt-kötő felszínének jellemzése
13. Kókai Eszter, Volk B., Nagy J.: A pirrolopirimidin váz szintézise tandem-gyűrűzárási reakcióval
14. Komjáti Balázs, Szokol B., Poppe L., Nagy J.: Arilboronsavak és fenolok réz-katalizált kapcsolási reakciójának számításhoz kémiai vizsgálata
15. Komjáti Balázs, Nagy J.: Kétparaméteres dupla-hibrid funkcionál kifejlesztése cirkuláris dikroizmus spektrum pontos becsléséhez
16. Krisch Enikő, Messenger L., Gyarmati B. S., Ravaine V., Szilágyi A.: Redox és pH érzékeny poli(aszparaginsav) nanogélek
17. Romhányi V., Kun Dávid, Pukánszky B.: Lignoszulfonát szerkezetének szerepe polimer keverékekben
18. Lábas Anikó, Krámos B., Oláh J.: Kation- $\pi$  kölcsönhatások vizsgálata kvantumkémiai (QM) és kombinált kvantumkémiai és molekulamechanikai (QM/MM) módszerekkel
19. Link Zoltán, Renner K., Móczó J., Braun H., Burgstaller C., Doshev P., Gahleitner M., Pukánszky B.: Szabályozott szerkezetű PP/fa/elasztomer hibrid kompozitok

20. Katalin Molnár, Behra J., Takács L., Kardos Zs., Faigl F.: Stabilizált foszfonátok HWE-reakciói: a Still-Gennari protokoll kiterjeszhetőségének vizsgálata
21. Nagy Balázs, Gazda K., Dobos G., Czakkel O., Geissler E., László K.: Nitrogén tartalmú szén aerogélek
22. Németh Csaba, Gyarmati B., Szilágyi A.: Poliaszparaginsav rezponzív tulajdonságainak módosítása
23. Olosz-Szabó Orsolya Erzsébet, Csiszár E., Kiss K., Tóth K. és Szakács G.: Szilárd fázisú fermentációjával előállított hidrolitikus és ligninolitikus enzimek extrakciójának vizsgálata kis frekvenciás ultrahang alkalmazásával
24. Katalin Solti, Némethy Á., Gyarmati B., Csányi E. és Szilágyi A.: Multirezponzív poli(aszparaginsav)-l-poli(n-izopropilakrilamid) kotérhálós hidrogélek
25. Szabó Kitti, Nagy Z., Juhász V., Zolnerciks J., Csorba A., Johnson W., Tímár Z., Molnár É., Krajcsi P.: Humán és patkány SLC22a5/Slc22a5 (OCTN2/Octn2) szerves kation/karnitin transzporter – fajspecifitási vizsgálatok
26. Szilágyi Barnabás Áron, Gyarmati B., Szilágyi A.: Redoxérzékeny poliaminosav hidrogélek
27. Feigl V., Gruiz K., Klebercz O., Ujaczki Éva: Vörösiszap talajra gyakorolt hatásának vizsgálata integrált metodika alapján

## **A bemutatott előadások összefoglalói**

# ADSZORPCIÓ MOLEKULÁRIS LENYOMATÚ POLIMEREKEN

**Dorkó Zs.<sup>1</sup>, Verbić T.<sup>2</sup>, Horvai G.<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>*Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szent Gellért tér 4., H-1111 Budapest, Magyarország*

<sup>2</sup>*Kémia Tanszék, Belgrádi Egyetem, Studentski Trg 12-16, 11000 Belgrád, Szerbia*

<sup>3</sup>*MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport, Szent Gellért tér 4., H-1111 Budapest, Magyarország  
zsdorko@mail.bme.hu*

A molekuláris lenyomatú polimerek (MIP-ek) olyan polimerek, amelyek egy adott célmolekula (templát) jelenlétében készülnek. A polimerizációhoz felhasznált monomerek (egy része) olyan funkciós csoportot tartalmaz, amely a templáttal másodlagos kötések révén asszociálódik. A polimerizáció és a templát eltávolítása után visszamarad a polimerben a templát térbeli és kémiai lenyomata. Ezért a polimer a templátot képes oldatból szelektíven adszorbeálni.

A NIP-ek (nem imprintelt polimer) és MIP-ek sokoldalúan használhatóak (pl: kromatográfiás töltet, SPE –szilárd fázisú extrakció- szorbens), nagy hátrányuk azonban a kis kötőkapacitás. Ezalatt azt értjük, hogy a funkciós csoport tartalomhoz képest viszonylag keveset tudnak nagy szelektivitással megkötni a célmolekulából. A különböző módokon előállított NIP-ek kötési tulajdonságainak vizsgálatához a propranolol molekulát (nem szelektív  $\beta$ -blokkoló) választottuk. Az alkalmazott közeg összetételét változtatva vizsgáltuk a lehetséges kötődési mechanizmusokat. Az adszorpciós kötőképességet a polimerben lévő titrálható funkciós csoportok mennyiségéhez viszonyítottuk.

A MIP-ek jellemzése az irodalomban eltérő módokon történik. Izotermákat kevés esetben mérnek ki, és ezeket bonyolult összehasonlítani. Nem megoldott a MIP-ek szelektivitásának jellemzése egyetlen számmal vagy egy egyszerű összefüggéssel.

Kutatásaink során különböző anyagok izotermáit határoztuk meg NIP-eken és MIP-eken. Az izotermákat egy újféle ábrázolásmódban megjelenítve jobban követhető, hogy valójában milyen előnyökhöz juthatunk az imprintelés során. Különböző típusú NIP-eket és MIP-eket tanulmányoztunk: a polimerek szelektivitása jól szemléltethető ebben az ábrázolásban.

Az imprintelés tényét legjobban a királis MIP-ek enantiomer-felismerő képességével lehet igazolni. A két enantiomer viselkedésének különbsége csakis az imprintelésből adódhat. Előállítottunk (*S*)-propranololra imprintelt polimert, és vizsgáltuk annak szelektivitását.

Összehasonlító mérésekkel megállapítottuk, hogy bizonyos esetekben a kereskedelmi forgalomban kapható SPE szorbensekkel hasonló szelektív elválasztást lehet elérni, mint a MIP-ekkel.

# HIPOJÓDOSSAV SZELEKTÍV MÉRÉSE AGI ÉS PT ELEKTRÓDDAL AZ OSZCILLÁLÓ BRIGGS-RAUSCHER REAKCIÓBAN ÉS ALRENDSZEREIBEN

**Holló Gábor**<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Fizika Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
H-1521 Budapest, Magyarország, hollo88@gmail.com*

A Briggs-Rauscher (BR) reakció egyike a legintenzívebben tanulmányozott kémiai oszcillátoroknak [1]. Az oszcilláló reakciók lelke az autokatalitikus intermedier. Azt feltételezzük, hogy ebben a reakcióban a hipójódosav (HOI) egy ilyen autokatalitikus intermedier lehet. Az állítás igazolásához szükségünk van ezen köztitermék koncentrációjának nyomonkövetésére. Azt találtuk, hogy ez lehetséges egy olvadék típusú AgI [1] vagy egy Pt elektród segítségével. Munkám során be kellett bizonyítanom, hogy az egyéb korróziós köztitermékek - mint például a jódosav (HOIO) - nem zavarják a szelektív HOI mérést.

Az oldhatósági határpotenciál fölött az AgI elektród a felületi ezüst ion koncentrációt méri. Mivel a HOI képes reagálni az AgI-al, és ebben a korróziós reakcióban ezüst ionok keletkeznek az elektród felületén, így képesek vagyunk megmérni a tömbfázisbeli HOI koncentrációt. Az úgynevezett korróziós potenciál elmélet segítségével belátható, hogy a HOI által létrehozott elektródpotenciál a Nernst-egyenletnek megfelelő.

Elméletileg a HOIO a HOI-hoz hasonló korróziós jelet adhat, ami megzavarhatja a szelektív HOI mérést. Kísérleti eredményeim szerint azonban az AgI elektród nem reagál a HOIO-ra HOI jelenlétében. Ezen tapasztalatok alapján kalibráltam az elektródot HOIO-ra és HOI-ra, melyeket egy módosított recept alapján állítottam elő. Mivel a HOIO diszproporcionálódása során HOI keletkezik, így a HOIO-ra adott potenciál választ rezorcín jelenlétében mértem meg, mely képes a HOI gyors eltávolítására. Továbbá megmértem a HOI – rezorcín reakció sebességi együtthatóját is. Ezekből az eredményekből egy kézirat készült, melyet a J. Phys. Chem. A-be szándékozunk benyújtani [2].

Folyamatban levő kutatások:

Előzetes eredmények szerint a platina egy HOI/I<sub>2</sub> elektródnak tekinthető az ún. jóid hidrolízis potenciál fölött (amikor a hipójódosav koncentráció nagyobb mint a jodid koncentráció).

Potenciometrius méréseink azt mutatják, hogy a HOI autokatalitikus köztitermék a jodát – hidrogénperxid – mangán rendszerben (ami a BR oszcillátor egyik alrendszere)

Készülőben van egy olyan berendezés, amellyel egyszerre lehet majd mérni a fejlődő CO/CO<sub>2</sub> gázokat valamint az elektródpotenciált. Feltételezzük, hogy a CO és CO<sub>2</sub> gázok a BR reakcióban szerves savak és HOI Hunsdiecker-típusú dekarbonileződési és dekarboxileződési reakciójában keletkeznek gyökös folyamatok során.

**Köszönetnyilvánítás:** Ez a munka az OTKA 77908 támogatásával készült. Továbbá köszönöm a segítségét a Kémiai Fizika Csoportnak.

**Hivatkozások:**

[1] Muntean N., Lawson B. T., Kály-Kullai K., Wittmann M., Noszticzius Z., Onel, L., Furrow, S.D. *J. Phys. Chem. A*, **2012**, *116*, 6630–6642.

[2] Holló G., Kály-Kullai K., Lawson B. T., Noszticzius Z., Wittmann M., Muntean N., Furrow, S.D., Schmitz, G. *(kézirat készülőben)*

# POLI(N-IZOPROPILAKRILAMID) HIDROGÉLEK KÖLCSÖNHATÁSAI KÖRNYEZETILEG ÉS ORVOSBIOLÓGIAILAG RELEVÁNS KIS AROMÁS MOLEKULÁKKAL

**Manek E.<sup>1</sup>, Domján A.<sup>2</sup>, Madarász J.<sup>3</sup>, László K.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, BME, 1111 Budafoki út 8.

<sup>2</sup>NMR Spektroszkópia Laboratórium, Szerves Kémia Intézet, Természettudományi Kutatóközpont, Magyar Tudományos Akadémia, 1525 Pusztaszeri út 59-67

<sup>3</sup>Szerves Kémia és Technológia Tanszék, BME, 1111 Műgyetem rakpart 3.  
emanek@mail.bme.hu

A poli(N-izopropilakrilamid) (PNIPA) hidrogélek reverzibilis, diszkontinuos fázisátmenetükről, térfogatváltozásukról („volume phase transition” = VPT) ismertek, mely kiváltható kémiai és fizikai ingerekkel is, mint a hőmérséklet és a pH megváltoztatásával, ionok jelenlétével, az elegyösszetétel módosításával, fényel, elektromágneses sugárzással, elektromos, illetve mágneses térrel. Térfogatuk az alsó kritikus szételegyedési hőmérsékleten („lower critical solution temperature” = LCST) jelentős mértékben csökken, a gélhálózat kollapszál. LCST-jük az ember test hőmérsékletének (34 °C) közelében van. A PNIPA hidrogélek lehetséges felhasználási területei széleskörűek: irányított gyógyszerhatóanyag szállítás, aktuátorok, kemomechanikai eszközök, kémiai kapcsolók, hőmérséklettel szabályozott extrakció, bioszeparáció, szenzorok előállítása, enzim immobilizáció, immundiagnosztika, génterápia, termoreszponzív önrendező micellák. A hidrogél egyes aromás szennyezőkre való érzékenysége szintén fontos alkalmazástechnikai tulajdonsága lehet.

A fenti felhasználási lehetőségek a PNIPA adszorpciós, retenciós és szeparációs tulajdonságain alapulnak. Egyes kis aromás molekulák még alacsony koncentrációban is jelentősen módosíthatják a hidrogél fázisátmeneti hőmérsékletét, mert a hidrofób molekulák megváltoztathatják a víz oldószer-minőségét. A VPT eltolódás mértéke a vendégmolekula kémiai minőségének és koncentrációjának függvénye, pontos mechanizmusa azonban még nem ismert. Bizonyos additív molekulák egy kritikus koncentrációjánál adott hőmérsékleten a hidrogél gyors kollapszust szenvedhet.

Kutatásunk során szisztematikus vizsgálatokkal tanulmányoztuk környezetileg és orvosbiológiailag releváns kismolekulák – dopamin, ibuprofen, illetve különböző fenolok (pl. fenol, pirokatekin, floroglucin, pirogallol) kölcsönhatását a PNIPA hidrogéllal. Megvizsgáltuk, hogy mely molekulák képesek a fázisátmenet kiváltására, a kollapszus mekkora kritikus koncentrációknál következik be, és hogy az egyes adalékok milyen módon befolyásolják a VPT-t. A polimer oldalláncok és a fenolok közti távolságot a kölcsönhatás során CRAMPS („combined rotation and multiple-pulse spectroscopy”) szilárd <sup>1</sup>H NMR spektroszkópiai mérésekkel és a sűrűségfunkcionál elmélet alkalmazásával („density functional theory” = DFT) tanulmányoztuk. A vendégmolekulák minőségének és koncentrációjának hatását a VPT-re differenciális pásztázó mikrokolorimetriával mértük. Az aromás molekulák kritikus koncentrációját, illetve a gél aromás felvételét duzzasztási kísérletekkel állapítottuk meg. Röntgen pordiffrakcióval vizsgáltuk, hogy a hidrogél által felvett aromás molekulák amorf vagy kristályos állapotban vannak-e jelen a gélhálózatban. [1-3]

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönettel tartozunk az OTKA K101861 és ENSOR 267269 számú projekteknek.

## **Referenciák:**

[1] A. Domján, E. Manek, E. Geissler, K. László, *Macromolecules*, 46, 3118 (2013).

[2] K. László, E. Manek, Sz. Vavra, E. Geissler, A. Domján, *Chemistry Letters*, 41, 1055 (2012).

[3] A. Domján, E. Manek, E. Geissler, K. László, 12th Annual UNESCO/IUPAC Workshop and Conference on *Macromolecules & Materials*, Stellenbosch, Book of abstracts, Poster No.20. (2013).



# Proteinek konformációja a fordított fázisú kromatográfiás rendszerben

<sup>1,2</sup>Bobály B., <sup>2</sup>Tóth E., <sup>2</sup>Drahos L., <sup>3</sup>Zsila F., <sup>3</sup>Visy J., <sup>2</sup>Vékey K., <sup>1</sup>Fekete J.

<sup>1</sup>*Szerveetlen és Analitikai Kémia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.*

<sup>2</sup>*Szerkezeti Kémiai Osztály, Természettudományi Kutatóközpont, Magyar Tudományos Akadémia, 1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.*

<sup>3</sup>*Biokémiai Farmakológiai Osztály, Természettudományi Kutatóközpont, Magyar Tudományos Akadémia, 1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67.  
e-mail.: [bobaly.balazs@gmail.com](mailto:bobaly.balazs@gmail.com)*

Hosszú távú kutatási célunk során proteineket izolálunk komplex mátrixokból. Az izoláláshoz fordított fázisú kromatográfiás frakcionálást használunk. Az izolálási módszer optimalizálása során szokatlan elúciós tulajdonságokat figyeltünk meg, melyek összefüggésben vannak a proteinek kromatográfiás rendszerben megfigyelhető konformációs változásaival.

A frakcionálás során fontos, hogy a proteineket jó visszanyeréssel tudjuk izolálni. Korábbi eredmények alapján az eluensben alkalmazott ionpárpépző additív (trifluorecetsav, TFA) koncentráció változtatásával a visszanyerés jelentősen befolyásolható. Ezt a hatást vizsgálva azt tapasztaltuk, hogy kis TFA koncentráció (<0,005 v/v%) és közepes eluenserősség (35% acetonitril, 65% H<sub>2</sub>O) mellett elérhető, hogy a proteinek holtidő előtt eluálódjanak. Ez akkor valósulhat meg, ha a proteinek kizáródnak a kromatográfiás töltet pórusaiból. A TFA koncentráció növelésével a póruskizárás megszűnik, a proteinek holtidő után eluálódnak. Tömegspektrometriás és cirkuláris dikroizmus vizsgálatok eredményei alapján elmondható, hogy a póruskizárt és pórusokból nem kizárt proteinek konformációja között szignifikáns különbség van. A konformáció-változáshoz szükséges TFA koncentráció a protein minőségétől is függ, így az általunk leírt kromatográfiás viselkedés alkalmas proteinek konformációs állapotán alapuló elválasztások kidolgozására. Ha proteinek kis molekuláktól való gyors elválasztása a cél, akkor a módszer alkalmazásával a makromolekulák izolálhatók holtidő előtt, míg a kismolekulák a töltet pórusaiba diffundálva holtidőben, vagy utána eluálódnak.

## Ref.:

B. Bobály et al., J. Chrom. A., 1325 (2014) p. 155.

# A MIKROHULLÁMÚ TECHNIKA ALKALMAZÁSÁNAK LEHETŐSÉGEI KATALITIKUS REAKCIÓKBAN

**E. Jablonkai<sup>a</sup>, Gy. Keglevich<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1521 Budapest, Magyarország  
ejablonkai@mail.bme.hu

Napjainkban egyre szélesebb körben alkalmazzák a mikrohullámú (MW) technikát különböző reakciók megvalósítása során. Munkánk során célul tűztük ki különböző katalitikus reakciók vizsgálatát MW körülmények között.

A foszfinátok előállíthatók foszfinsavak (1-hidroxifoszfóln-oxid, 1-hidroxifoszfóln-oxid, 1-hidroxil-1,2,3,4,5,6-hexahidrofoszfinin-oxid) alkil-halogenidekkel történő szilárd-folyadék kétfázisú alkilező észterezésével, így elkerülhető a foszfinsav-kloridok alkalmazása. MW besugárzás esetén a normál reakcióképességű alkilezőszerekkel végzett reakciók során a fázistranszfer katalizátor bemérése teljes átalakulást tett lehetővé. Továbbá kihívást jelentett számunkra a hőre érzékeny 1-hidroxil-1,2-dihidrofoszfinin-1-oxid és a 3-hidroxil-3-foszfobiklohexán-1-oxid alkilező észterezése, mely átalakítások során a hagyományos hőközlés bizonyult hatékonyabbnak.

Kutatócsoportunkban korábban már vizsgálták foszfinsavak direkt észterezését MW körülmények között, de a reakció csak magas hőmérsékleten hosszú reakcióidő alkalmazása esetén játszódott le. A foszfinsavak direkt amidálása pedig még erélyes körülmények között is csak gyenge termeléssel szolgáltatja a megfelelő foszfinsav amidot. A T3P<sup>®</sup> reagenst eredményesen alkalmazták észterezésekben, amidálásokban, dehidratálási, átrendeződési és kondenzációs reakciókban. Így célul tűztük ki a foszfinsavak észterezésének és amidálásának megvalósítását T3P<sup>®</sup> jelenlétében. Szobahőmérsékleten 1-3 óra után jó ill. kiváló termeléssel jutottunk a megfelelő foszfinátokhoz illetve foszfinsav amidokhoz.

Vizsgáltuk >P(O)H származékok Michael-addícióját 1-fenil-2-foszfóln-1-oxidra. Azt tapasztaltuk, hogy MW körülmények között a dialkil-foszfitek illetve a difenilfoszfin-oxid könnyen addíciónáltak a 2-foszfóln-1-oxid kettőskötésére trimetil-alumínium (Me<sub>3</sub>Al) alkalmazása nélkül.

A szerves szintetikus kémia igen fontos részét képezik a P-C kapcsolási reakciók. Tanulmányozni kívántuk különböző >P(O)H funkciót tartalmazó vegyületek (dialkil-foszfitek, *H*-fenilfoszfinátok, szekunder foszfin-oxidok) és ari-lbromidok P-C kapcsolási reakcióját Pd(OAc)<sub>2</sub> jelenlétében *P*-ligandummentes MW körülmények között. Az általunk kidolgozott eljárás egy környezetbarátabb alternatív módszerként szolgálhat P-C kötés kialakítására.

Eredményeink alapján elmondható, hogy a MW technika sok esetben elősegítette a gyorsabb és hatékonyabb reakciót. A MW besugárzás alkalmazásának köszönhetően bizonyos esetekben elhagyhatók voltak reakciókomponensek (úgy mint bázis (Me<sub>3</sub>Al), ill. *P*-ligandum).

**Köszönetnyilvánítás:** OTKA No K067679 és K83118, Kutatóegyetem

## **References:**

- [1] E. Jablonkai, Gy. Keglevich, Curr. Org. Chem., in press (2014).
- [2] E. Jablonkai, Gy. Keglevich, Tetrahedron Lett., 54, 4185 (2013).

# FENILPIRROL ALAPVÁZÚ ORGANOKATALIZÁTOROK SZINTÉZISE ÉS ALKALMAZÁSA

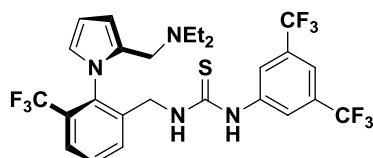
Erdélyi Zsuzsa,<sup>1</sup> Mátravölgyi Béla,<sup>2</sup> Faigl Ferenc<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

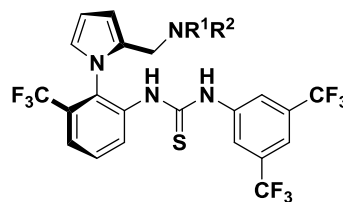
<sup>2</sup>MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport, 1111 Budapest, Budafoki út 8.  
email: [zserdelyi@mail.bme.hu](mailto:zserdelyi@mail.bme.hu)

Az irodalomban számos példa található bifunkciós tiokarbamid típusú vegyületek organokatalizátorként történő alkalmazására különböző enantioszelektív reakciókban [1,2]. Ezek a vegyületek hidrogén-donor és Lewis-bázikus tulajdonsággal rendelkeznek egy molekulán belül. A legtöbb ilyen katalizátor elektronszívó csoportokkal rendelkező aril ill. diaril tiokarbamid származék, mely *tercier* amino-csoportot is tartalmaz.

Kutatócsoportunkban optikailag aktív fenilpirrol alapvázú bifunkciós tiokarbamidokat állítottunk elő. Célvegyületeink a pirrol-gyűrűn tartalmazzák a *tercier* amino-csoportot, míg a tiokarbamid egység a fenil-gyűrűhöz kapcsolódik egy metilén-csoporton keresztül ((*S*)-**1**) illetve közvetlenül ((*S*)-**2a-e**). Az (*S*)-**2** típusú vegyületből különböző *tercier* amino-csoportokat tartalmazó származékokat is előállítottunk, e molekularész enantioszelektivitást befolyásoló hatásának vizsgálata érdekében.

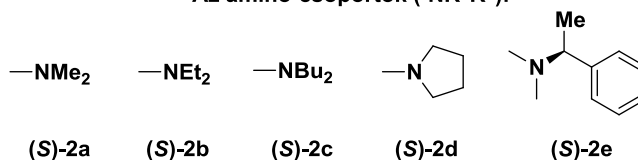


(*S*)-**1**

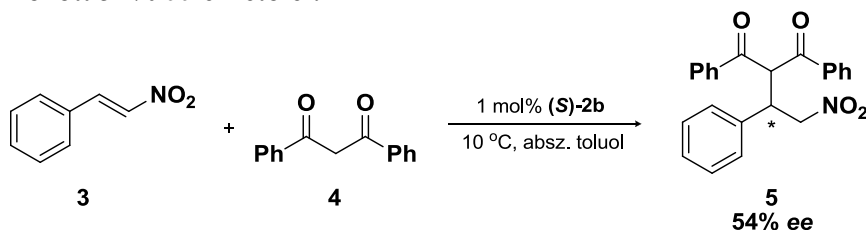


(*S*)-**2a-e**

Az amino-csoportok (-NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>):



Az előállított vegyületeket nitrosztírol (**3**) és dibenzoil-metán (**4**) reakciójában alkalmaztuk katalizátorként. A leghatékonyabb katalizátornak a (*S*)-**2b** bizonyult, mellyel a megfelelő körülmények között 54% *ee* érhető el.



## References:

- [1] T. Okino, Y. Hoashi, Y. Takemoto, J. Am. Chem. Soc., 125, 12672 (2003).  
[2] B. Vakulya, Sz. Varga, A. Csámpai, T. Soós, Organic Letters, 7, 1967 (2005).

# HETEROGÉN KÉTFÉMES KATALIZÁTOROK ELŐÁLLÍTÁSA, FELÜLETI VIZSGÁLATA, ALKALMAZÁSA SZERVES SZINTÉZISEKBEN

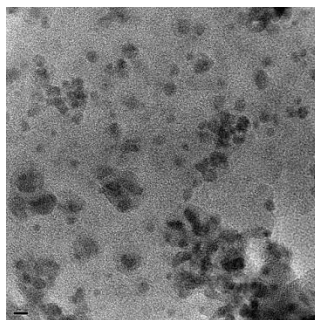
**Fodor Anna<sup>1,2</sup>, Magyar Ágnes<sup>1</sup>, Dr. Hell Zoltán<sup>1</sup>, Laurence Pirault-Roy<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék; 1111 Budapest, Budafoki út 8.

<sup>2</sup> Institute of Chemistry of Poitiers : materials and natural resources (IC2MP), University of Poitiers, 4, rue Michel Brunet (Bât B27) 86022 Poitiers, Franciaország  
fodoranna@ch.bme.hu

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén több éve folynak kísérletek különböző szilárd savak és szilárd bázisok felhasználhatóságának vizsgálatára szerves kémiai szintézisekben. Munkánk célja különböző szerves kémiai reakciók megvalósíthatóságának vizsgálata volt rézzel, illetve más fémionokkal módosított szilárd bázis típusú katalizátorokkal. Célunk elsősorban nem a reakciók optimalása volt, hanem áttekintő képet kívántunk nyerni arról, hogy ezek az anyagok milyen területeken alkalmazhatók.

Korábban sikeresen valósítottuk meg az úgynevezett A<sup>3</sup>-reakciót, ami aldehidek, alkinek és aminok kapcsolása propargilamin-származékokká. Megállapítottuk, hogy a réz a bázikus 4Å molekulaszita hordozón kiválóan használható ebben a reakcióban [1]. A továbbiakban célul tűztük ki kétfém-katalizátorok előállítását és vizsgálatát. Először a réz-palládium párost vizsgáltuk. Az általános eljárás ilyen katalizátorok előállítására az együttes impregnálás vagy a fémkomponensekkel történő egymást követő impregnálás. A kétféle eljárással előállított katalizátorok felületi tulajdonságait vizsgáltuk különböző módszerekkel (TEM, TPR, XRD, BET, stb.), ami fizikokémiai tulajdonságaik összehasonlítását tették lehetővé.



Cu-Pd-4Å szukcesszív impregnálással – TEM

A katalizátorok aktivitását a Suzuki-kapcsolásban teszteltük. Különböző fenilboronsav-származékokkal illetve aromás halogénszármazékokkal valósítottuk meg a kapcsolást. Vizsgáltuk a katalizátor visszaforgathatóságát is. A használt katalizátor felületi tulajdonságainak elemzése (XRD, TEM) segítségével az aktivitás és stabilitás magyarázatát kerestük. A munka folytatásaként tervezzük kipróbálni ezeket a katalizátorokat más szerves kémiai szintézisekben is.

**Köszönetnyilvánítás:** A szerző köszönettel tartozik a Francia Államnak, melynek ösztöndíja lehetővé tette a kutatócsoportok együttműködését.

## Hivatkozások:

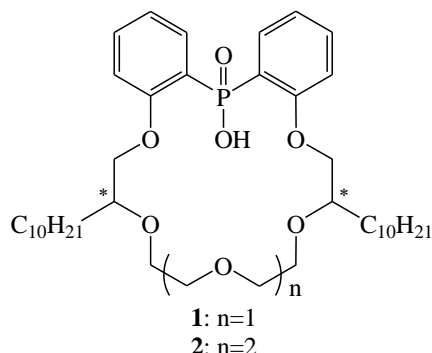
[1] A. Fodor, A. Kiss, N. Debreczeni, Z. Hell, I. Gresits, Org. Biomol. Chem. 8, 4575 (2010)

# ENANTIOMERTISZTA, LIPOFIL, DIARILFOSZFINSAV EGYSÉGET TARTALMAZÓ KORONAÉTEREK SZINTÉZISE ÉS SZELEKTÍV TRANSPORTÁLÓ KÉPESSÉGÜK VIZSGÁLATA

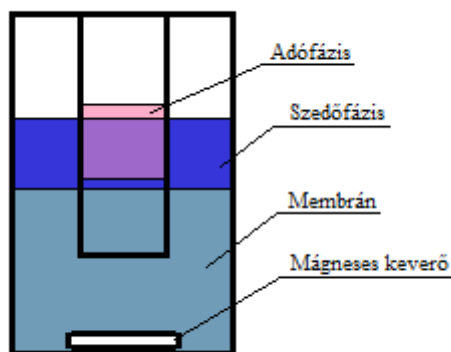
Szabó T., Hirsch E., Tóth T., Huszthy P.

Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Magyarország, Budapest, Szent Gellért tér 4.

Csoportunk régóta foglalkozik koronaéterek szintézisével. Munkánk során célunk volt olyan lipofil koronaéterek szintézise, melyek alkalmasak lehetnek vizes adófázis / szerves folyadéktömb membrán / vizes szedőfázis rendszerben zajló, pH gradiens által megvalósított szelektív transzportra.



Sikeresen előállítottuk az **1** és **2** makrociklusokat enantiomertiszta formában, az **1** koronaéter esetén mind az (*R,R*) mind pedig az (*S,S*) enantiomert szintetizáltuk a racém kiindulási anyagból, ezzel bemutatva, hogy a szintézis során mindkét enantiomer felhasználható. Vizsgáltuk továbbá a koronaéterek fenilcsoportokon való módosításának lehetőségeit is, előállítottunk nitro- és *tert*-butilcsoportokat tartalmazó makrociklusokat is. Az előállított ligandumokkal fémionok, illetve akirális és királis primer aminok transzportját vizsgáltuk. A transzportkészülék sematikus ábrája az alábbi rajzon látható.



**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönetüket fejezik ki az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramoknak (OTKA No. K81127) az anyagi támogatásért.

# ÚJ $\beta$ -KARBOLIN- ÉS TIENOPIRIDIN-SZÁRMAZÉKOK ELŐÁLLÍTÁSA

**P. Ábrányi-Balogh<sup>1</sup>, M. Milen<sup>2</sup>, Z. Mucsi<sup>1</sup>, Gy. Keglevich<sup>1</sup>**

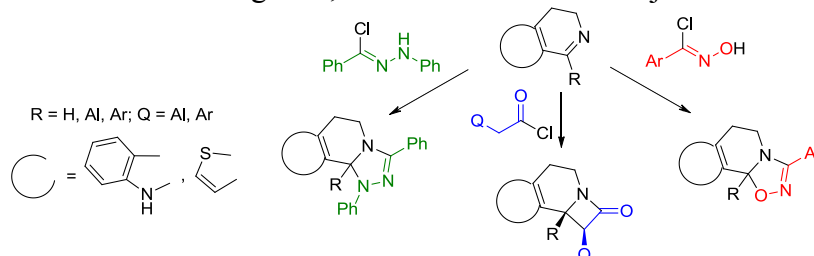
<sup>1</sup>Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1521 Budapest, Magyarország

<sup>2</sup>Kémiai Kutatási Főosztály, Egis Gyógyszergyár Nyrt., 1475 Budapest pf. 100, Magyarország  
abpeter@gmail.com

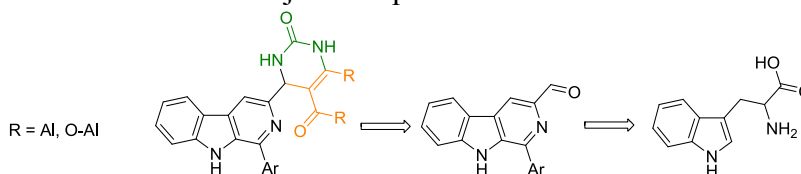
A  $\beta$ -karbolinváz számos természetes és szintetikus eredetű, farmakológiailag aktív vegyületben megtalálható. Ezek közül a vinpocetin, a tadalafil és az abecarnil forgalomban lévő gyógyszerek, rendre agyi vérkeringési zavarok, potenciazavarok és szorongás-ellenes hatással bírnak. A négy kondenzált gyűrűt tartalmazó  $\beta$ -karbolinszármazékok csoportjába tartozik a harmicin, az akagerin, az arborescudin típusú alkaloidok, a cantinvázias vegyületek, valamint az eudistominok egy része. Ezek a vegyületek többek között antibakteriális, antivirális, vagy rákellenes hatást is mutatnak.

Bár a tienopiridinek a természetben nem fellelhető vegyületek, képviselőik mégis jelentős biológiai hatást mutatnak. A ticlopidint, az (*S*)-clopidogrelt és a prasugrelt agyérelzáródás, szívroham, érelmeszesedés kezelésére, illetve trombózis megelőzésére alkalmazzák a gyógyászatban. A kétezres évek közepén az (*S*)-clopidogrel-biszulfát (Plavix<sup>®</sup>) a világ gyógyszerpiacának második legkeresettebb gyógyszere volt.

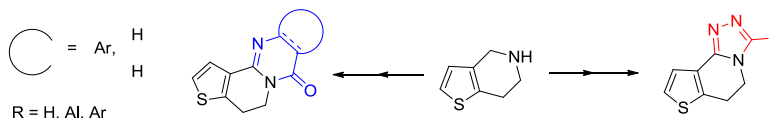
PhD munkám során megvalósítottuk 1,3-dipoláris cikloaddició, valamint Staudinger-szintézis segítségével különböző tetraciklusos  $\beta$ -karbolinok előállítását, illetve az alkalmazott reakciók kiterjesztését az analóg tienopiridin alapvázra is. A reakciók mechanizmusát kvantumkémiai számításokkal vizsgáltuk, több mellékreakciót és új reakcióutat derítettünk fel.



Racém triptofánból 1-aryl- $\beta$ -karbolin-3-karbaldehideket állítottunk elő. Az aldehidek Biginelli-reakcióban alkalmazásával új dihidropirimidinon-származékokat szintetizáltunk.



Tetrahidrotienopiridinből több lépésben új dihidrotieno-triazolo-piridin- és dihidrotieno-pirido-kinazolonszármazékokat alakítottunk ki.



Az általunk szintetizált több mint száz új vegyületben a gyakorta biológiai aktivitást mutató gyűrűk kondenzálása farmakológiai szempontból is érdekes molekulákat eredményezhet, amennyiben az új vegyület rendelkezik az egyik, vagy akár mindkét alkotó megfelelő tulajdonságaival.

# 1-FENILPIRROL ALAPVÁZÚ AMINOALKOHOLOK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS ALKALMAZÁSA ASZIMMETRIKUS SZINTÉZISBEN

Sz. Deák<sup>1</sup>, B. Mátravölgyi<sup>2</sup>, F. Faigl<sup>1,2</sup>

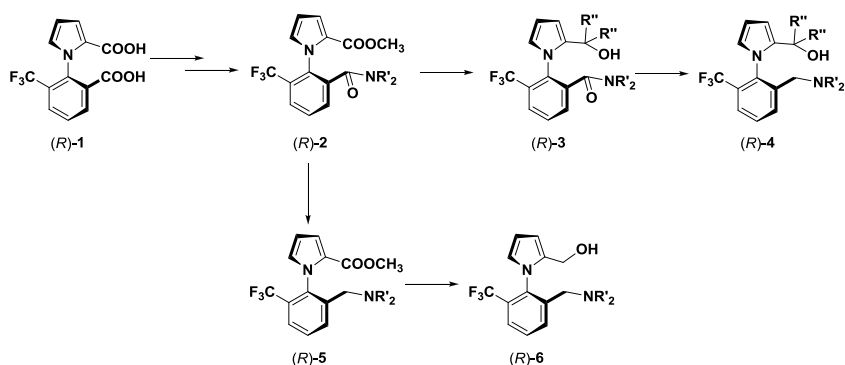
<sup>1</sup> BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

<sup>2</sup> MTA Szerves Kémia és Technológia Tanszéki Kutatócsoport, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

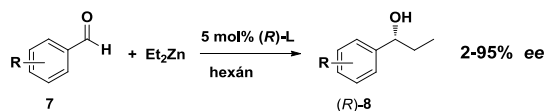
email szdeak@mail.bme.hu

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő kutatócsoportban már több éve folynak új arilpirrol származékok előállítását és tulajdonságaik vizsgálatát célzó kutatások. Munkánk az 1-fenilpirrol alapvázat tartalmazó, axiális kiralitáselemmel rendelkező aminoalkohol származékok szintézise volt.

Célunk elérése érdekében az optikailag aktív dikarbonsav-származékból ((*R*)-**1**) a megfelelő *tercier* savamidokat ((*R*)-**2**) állítottunk elő. A kapott vegyületek észter-csoportjának alkohol-funkcióvá ((*R*)-**3**) történő átalakítását Grignard reagens addíciós reakciójában valósítottuk meg. Ezt követően az aminoalkoholokhoz ((*R*)-**4**) az amid-csoport borán dimetil-szulfid komplexszel történő redukciójával jutottunk. Továbbá még *primer* alkohol részt tartalmazó származékokat is előállítottunk. Először a (*R*)-**2** savamid rész kemoselektív redukciójával a (*R*)-**5** jutottunk, majd pedig az észter funkció redukcióját végeztük el, és jutottunk a (*R*)-**6** származékokhoz.



Az előállított atropizomer aminoalkoholokat ((*R*)-**4** és (*R*)-**6**) dietil-cink és aromás aldehidek addíciós reakciójában vizsgáltuk katalizátor ligandumként. Vegyületeinket először a modellvegyület benzaldehid (**7**) reakciójában próbáltuk ki annak érdekében, hogy a különböző helyettesítőkkal rendelkező aminoalkoholok szerkezete és hatása között összefüggéseket állapíthassunk meg. A reakciókat dietil-cink 1 M hexános oldatában végeztük. Vizsgáltuk a hőmérséklet hatását, és több szubsztituált aromás aldehid esetén is jó enantiomerszelektivitást tapasztaltunk az addíciós reakcióban.



**Köszönetnyilvánítás:** A munkát a Richter Gedeon Talentum Alapítvány és az OTKA (projekt száma: K 104528) támogatásával végeztük.

**Hivatkozás:**

[1] P. Salehi, M. Dabiri, G. Kozehgary, M. Baghbanzadeh, Tetrahedron: Asymmetry, 20, 2609, (2009).

# SZEKUNDER ALKOHOLOK ENZIMATIKUS ELVÁLASZTÁSA CLICK-KÉMIA SEGÍTSÉGÉVEL

Kókai Eszter<sup>1</sup>, Farkas Emese<sup>1</sup>, Boros Zoltán<sup>1</sup>, Nagy József<sup>1</sup>, Kovács Péter<sup>2</sup>, Hornyánszky Gábor<sup>1</sup>, Poppe László<sup>1</sup>

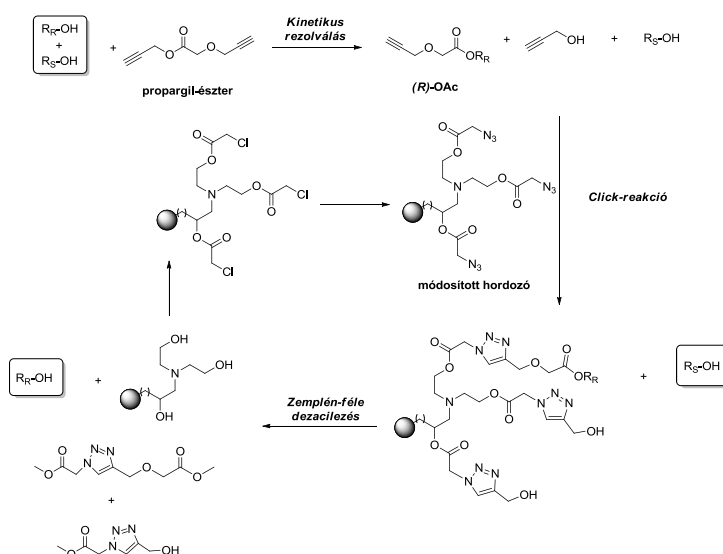
<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3, ekokai@mail.bme.hu  
<sup>2</sup>Magyar Tudományos Akadémia, Kémiai Kutatóközpont,  
1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67, Szerves Kémia Intézet

Az enantiomerek az élő szervezetre gyakorolt eltérő hatása miatt a tudományos kutatások a sztereoizomerek elválasztásának irányába fordultak.

Célunk szekunder alkoholok ( $R_R$ - és  $R_S$ -OH) kinetikus rezolválása, valamint a reagálatlan enantiomertől ( $R_S$ -OH) való elválasztás megoldása általunk módosított szilárd hordozó segítségével (1. ábra). Munkánk során négy különböző szekunder alkohol [1-ciklohexiletanol, 1-feniletanol, 1-fenilpropán-2-ol,  $\beta$ -tetralol] lipáz katalizált rezolválását tervezzük megvalósítani. Első feladatunk a rezolválószerként alkalmazott prop-2-inil-2-(prop-2-iniloxi)-acetát (propargil-észter) kétlépéses szintézisének optimalálása. Az acilezőszer fontos szerepet játszik a biokatalizált átalakításban. Egyrészt fontos, hogy gyorsító hatása legyen az enantioszelektív enzimatisztázásra, valamint a kinetikus rezolválást irreverzibilissé tegye. A racém észter segítségével kifejlesztett enantiomerösszetétel vizsgálati módszerek teszik majd lehetővé az enzimatisztázási reakciók követését. A kinetikus rezolválást királis állófázisú gáz-, illetve folyadékkromatográfiával követjük.

Mivel a kinetikus rezolválással csak 50%-os konverzió érhető el, ezért szükséges a reagálatlan enantiomer ( $R_S$ -OH) elválasztása. Ezt az általunk módosított szilárd hordozón Click-kémia segítségével kívánjuk megvalósítani. Célunk, hogy a hordozó felületén megkössük a nagy enantiomertisztaságú acilezett észtert [ $(R)$ -OAc], ezután a reagálatlan enantiomert lemoszuk ( $R_S$ -OH), végül Zemlén-féle dezacilezéssel kinyerjük a megkötött észterből a másik enantiomer alkoholt ( $R_R$ -OH) és egyúttal regeneráljuk a szilárd hordozót.

A Click-kémia alkalmazása teszi lehetővé, hogy a reagálatlan enantiomertől oszlopkromatográfiás elválasztás nélkül kinyerjük a nagy tisztaságú enantiomer alkoholt.



1. ábra



# MIKROSZENNYEZŐ ANYAGOK KÖRNYEZETTOXIKOLÓGIAI VIZSGÁLATA *DAPHNIA MAGNA* SZÍVRITMUS TESZTTTEL

M. Molnár<sup>1</sup>, Zs.M. Nagy<sup>1</sup>, K. Gruiz<sup>1</sup>, I. Fekete-Kertész<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Szent Gellért tér 4, Budapest, Magyarország

Napjainkban növekvő érdeklődés övezi azokat a vegyi anyagokat, melyeket az angol szakirodalom „*Emerging pollutants*” néven említ. Ezek között az újonnan felismert káros hatású vegyi anyagok között találhatunk gyógyszerhatóanyagokat, ipari segédanyagokat/lágyítókat, nanoanyagokat, felületaktív anyagokat, növényvédőszerket, sőt még táplálékkiegészítőket, élelmiszeradalékokat és élvezeti szereket is. Keveset tudunk még ezeknek a kis koncentrációban jelenlevő vegyületeknek a sorsáról, valamint bomlástermékeik másodlagos hatásáról. Ezen okokból kifolyólag sürgető az igény új érzékenyebb környezettoxikológia módszerek kidolgozására, melyekkel a lehetséges káros hatásokat már ilyen kis koncentrációban előforduló szennyezőanyagok esetében is egyértelműen bizonyítani lehet [1-6].

A *Daphnia magna* egy édesvízi rákféle, melynek fejlett keringési rendszerének köszönhetően lehetőség nyílik a különböző szennyezőanyagok a szívritmusra gyakorolt hatásának vizsgálatára. Ennek az újonnan alkalmazott innovatív mérési végpontnak az érzékenysége a hagyományosan alkalmazott halálozást és mozgásképtelenséget tesztelő végpontokkal szemben jóval nagyobb, ezáltal lehetővé teszi a vizekben megjelenő mikro-szennyezőanyagok toxikus hatásának kimutatását.

A módszer kidolgozása során a környezetben való előfordulás, és potenciális káros hatás szempontjából releváns vegyületekkel végeztem a tesztek. Évezeti szerek közül a nikotint, gyógyszerhatóanyagok közül a diklofenákot és a paracetamolt, egy hormont, a  $\beta$ -ösztradiolt, antimikrobiális szerként a triklozánt, nanovegyületként a nano titán-dioxidot, növényvédőszerket pedig a metazaklórt vizsgáltam a koncentráció függvényében 0,01  $\mu\text{g/l}$ –10 mg/l koncentráció tartományban. A letalitás és az immobilitás teszteket az OECD 202. protokoll alapján végeztem. [5-6].

A 7 különböző vegyület esetén tapasztalt LOEC (48 h) értékek a következők voltak: nikotin: 1 ppm; paracetamol: 0,5 ppm; metazaklór: 0,01 ppm; nano titán-dioxid: 0,001 ppm; triklozán: 0,0005 ppm; diklofenak és ösztradiol: 0,0001 ppm.

**Köszönetnyilvánítás:** A projekt a Nemzeti Innovációs Hivatal anyagi támogatásával valósult meg (TECH\_08-A4/2-2008-0161, CDFILTER és TECH\_09-A4-2009-0129, SOILUTIL projekt).

## Referenciák:

- [1] Brennan, S.J., Brougham, C.A., Roche, J.J., Fogarty, A.M., 2006. Multi-generational effects of four selected environmental oestrogens on *Daphnia magna*, *Chemosphere* 64 (2006) 49–55
- [2] Daughton, C.G. (2004) Non-regulated water contaminants: emerging research. *Environmental Impact Assessment Review* 24, 711–732
- [3] Kolpin, D.W., Furlong, E.T., Meyer, M.T., Thurman, E.M., Zaugg, S.D., Barber, L.B., Buxton, H.T. (2002) Pharmaceuticals, hormones, and other organic wastewater contaminants in U.S. streams, 1999–2000: a national reconnaissance. *Environmental Science & Technology*, 36, 1202–1211
- [4] Ohe, P.C., Dulio, V., Slobodnik, J., Deckere, E., Kühne, R., Ebert, R.U., Ginebreda, A., Cooman, W., Schüürmann, G., Brack, W., 2011. A new risk assessment approach for the prioritization of 500 classical and emerging organic microcontaminants as potential river basin specific pollutants under the European Water Framework Directive, *Science of the Total Environment* 409 (2011) 2064–2077
- [5] Villegas-Navarro, A., Rosas-L, E., Reyes, J.L., 2003. The heart of *Daphnia magna*: effects of four cardioactive drugs. *Comparative Biochemistry and Physiology Part C* 136 (2003) 127–134
- [6] Dzialowski, E.M., Turner, P.T., Brooks, B.W. (2006) Physiological and Reproductive Effects of Beta Adrenergic Receptor Antagonists in *Daphnia magna*. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*, 50, 503–510

# Gyógyszerfelszívódási folyamatok modellezése *in vitro* penetrációs modellek segítségével

Balogh György Tibor<sup>1</sup>, Müller Judit<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Richter Gedeon Nyrt, Szintézistámogató Laboratórium, 1475. Budapest X. Pf. 27.

<sup>2</sup>BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8., j.muller@richter.hu

Az elmúlt két évtizedben az ipari gyógyszerkutatás gyakorlatában egyre nagyobb teret nyert a nagy áteresztőképességű szűrő vizsgálatok (high throughput screening, HTS) alkalmazása, melyek gyors, olcsó és kis anyagigényű technikák. Az elsődleges HTS biológiai szűrés során kiválasztott gyógyszerjelölt vegyületek jellemzően gyenge ADME (abszorpció, disztribúció, metabolizmus, exkréció) tulajdonságokkal rendelkeznek. Emiatt nélkülözhetetlenné vált, hogy a kutatás korai fázisában jellemezzék a vegyületek elsősorban felszívódási, biohasznosulási tulajdonságait.[1,2] Erre általánosan a transzportfolyamatokat leíró fizikai-kémiai paraméterek alkalmazhatóak, mint a proton-disszociáció ( $pK_a$ ), a lipofilitás ( $\log P/D$ ) és a permeabilitás ( $P_e$ , effektív permeabilitás).[3]

A gyógyszerkutatásban a hatóanyag felszívódásának jóslására egyik általánosan alkalmazott nem-sejtes alapú *in vitro* vizsgálat a PAMPA (parallel artificial membrane permeability assay) permeabilitás modell, mely a *per os* adagolt gyógyszerkincs közel 95%-ának felszívódási mechanizmusát leíró passzív diffúziós folyamatot modellezi.[4]

Munkám során az *in vitro* PAMPA módszer segítségével modelleztünk különböző körülmények között végbemenő gyógyszerfelszívódási folyamatokat. Szövetspecifikus foszfolipidmembránok alkalmazásával optimáltuk a vér-agy gáton és a gasztrointesztinális traktuson át történő felszívódást előrejelző modellt. Kidolgoztunk egy új módszert a szájüregi felszívódás előrejelzésére. Növényi kivonatok vér-agy gáton keresztüli átjutását vizsgáltuk PAMPA módszerrel.[5]

A gyógyszerek által kiváltott toxikus hatások közül az egyik legismertebb, több szervet is érintő jelenség a foszfolipidózis. Ez egy főként kationos amfifil gyógyszerek által okozott lipid-anyagcsere megváltozásával járó rendellenesség, ami egyes sejtekben a foszfolipidek felhalmozódásához vezethet.[6] A PAMPA rendszer segítségével kidolgoztunk egy új, robusztus módszert a foszfolipidózis előrejelzésére, mely jól alkalmazható a gyógyszerkutatás korai fázisában.[7]

**Köszönetnyilvánítás:** A munkát a Richter Gedeon Talentum Alapítvány támogatta

## Referenciák:

[1] A. Avdeef: Absorption and Drug Development Solubility, Permeability and Charge State, John Wiley & Sons, Inc (2012)

[2] E.H. Kerns, Journal of Pharmaceutical Sciences 90,1838 (2001)

[3] E.H. Kerns, L. Di, Drug Discovery Today 8, 316 (2003)

[4] M. Kansy, F. Senner, K. Gubernator, Journal of Medicinal Chemistry 41, 1007 (1998)

[5] Á. Könczöl, J. Müller, E. Földes, Z. Béni, K. Végh, Á. Kéry, Gy.T. Balogh, Journal of Natural Products, 76, 655 (2013)

[6] N. Anderson, J. Borlak, J. FEBS Letter, 580, 5533 (2006)

[7] Gy.T. Balogh, J. Müller, Á. Könczöl, European Journal of Pharmaceutical Sciences 49, 81 (2013)

# TERMESZTŐKÖZEG KIALAKÍTÁSÁT CÉLZÓ KÍSÉRLETEK VÖRÖSISZAPPAL KEVEREDETT TALAJ FELHASZNÁLÁSÁVAL

V. Feigl<sup>1</sup>, K. Gruiz<sup>1</sup>, O. Klebercz<sup>1</sup>, M. Molnár<sup>1</sup>, É. Ujaczki<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, Szent Gellért tér 4., Budapest, Magyarország

ujaczki.eva@gmail.com

2010. október 4-én magas pH-jú (pH=12) vörösiszap árasztotta el Ajkát és környékét, amikor átszakadt a vörösiszaptározó lúgos iszap hatására korrodálódott gátja [1][2]. A katasztrófa után 4-5 hónappal, a kárelhárítás során eltávolították a talajfelszínére rakódott vörösiszapot [3]. Jelenleg ezt a vörösiszap-talaj keveréket Ajka környékén tárolják, ezáltal költséget képezve, így a hasznosítási technológia kidolgozása szükségszerű. Laboratóriumi előkísérleteink alapján a vörösiszap talajjal keverve képes javítani a leromlott talajok minőségét.

Többléptékű szabadföldi kísérletet állítottunk össze, hogy tanulmányozzuk a vörösiszap-talaj keverék talajjavító hatását, alkalmazhatóságát természetközeg kialakítására. Első lépésben lizimétereket hoztunk létre, amelyekben rossz minőségű altalajt (amelyet az ASA Magyarország Gyáli hulladéklerakójában használnak takarásra) és vörösiszap-talaj keveréket kevertünk össze (ajkai elárasztott területekről eltávolított vörösiszap és talaj keveréke) 0, 20 és 40 %-ban. Második lépésben szabadföldi parcellákat hoztunk létre, ahol a vörösiszap-talaj keveréket 0, 10, 20, 50 és 100 %-ban kevertük az altalajba. A kísérleteket integrált monitoring módszeregyüttessel követtük nyomon, amely fizikai, kémiai, biológiai és környezettoxikológiai vizsgálatokat tartalmazott.

Az eredmények azt mutatták, hogy 20% vörösiszappal keveredett talaj pozitív hatással van az altalajra, így hasznosítható természetközeg kialakításához. A vörösiszappal keveredett talaj javította az altalaj szerkezetét. A vörösiszappal keveredett talaj és altalaj arány növekedésével szignifikáns javulás volt tapasztalható a víztartóképesség tekintetében. A létrehozott természetközeg teljes fémtartalma nem haladta meg a Magyarországon alkalmazott határértékeket. 20% vörösiszappal keveredett talaj kedvező hatással volt a talaj mikroflórájára. A növényi (*Sinapis alba*) és állati (*Folsomi candida*) toxicitás tesztnél nem tapasztaltunk növekvő gátló hatást az altalajra nézve a vörösiszappal kevert talaj alkalmazásakor. Az *Aliivibrio fischeri* (baktérium) biolumineszcencia gátlási teszténél azt tapasztaltuk, hogy 10% vörösiszappal keveredett talaj enyhén toxikus a tesztorganizmusra nézve, de ez a hatás idővel csökken. Az eredményeink alapján a vörösiszappal keveredett talaj alkalmas adalékanyag természetközeg létrehozására és a hulladéklerakók takarása mellett alkalmas lehetne meddőhányók vagy akár utak rézsűjének a takarására is.

**Köszönetnyilvánítás:** A munkát a Nemzeti Kutatási és Technológiai Hivatal (SOILUTIL TECH\_09-A4-2009-0129) támogatta.

## Hivatkozások:

- [1] W.M. Mayes, A.P. Jarvis, I.T. Burke, M. Walton, V. Feigl, O. Klebercz at al., Dispersal and attenuation of trace contaminants downstream of the Ajka bauxite residue (red mud) depository failure, Hungary, Environ Sci Technol 45 Vol, 5147-55 (2011)
- [2] U. Fügedi, I. Szentpétery, J. Kalmár, P. Kovács-Pálffy, P. Kónya, J. Vatai Geokémiai és ásványtani folyamatok a kolontári gátban, MTA Környezetgeokémiai Albizottság, Konferencia előadás (2011)
- [3] K. Gruiz, E. Vaszita, V. Feigl O. Klebercz, É. Ujaczki, A. Anton Environmental risk assessment of red mud contaminated soil in Hungary, Poszter, AquaConSoil2013 Conference, Barcelona (2013)

# A BÚZA ÉS SPELTA FEHÉRJÉINEK MOLEKULÁRIS HÁTTERE ÉS ALLERGÉN KARAKTERISZTIKÁJA

**A. KOVÁCS<sup>1</sup>, S.TÖMÖSKÖZI<sup>2</sup>, F.BÉKÉS<sup>3</sup>, L. LÁNG<sup>1</sup>, A. JUHÁSZ<sup>1</sup>, Z. BEDŐ<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> MTA Agrártudományi Kutatóközpont Mezőgazdaság Intézet, Martonvásár, 2462, Magyarország

<sup>2</sup> Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Budapest, 1111, Magyarország

<sup>3</sup> FBFD PTY LTD, Beecroft, NSW, 2119. Ausztrália

*kovacs.annamaria@agrar.mta.hu*

A búza az egyik olyan élelmiszer komponens, amely az egyre nagyobb százalékban megjelenő élelmiszerekkel kapcsolatos érzékenységi reakciókért felel. A két legelterjedtebb betegség a búza allergia és a cöliákia, melyeket búzából és egyéb gabonafélékből (árpa, rozs, zab, tritikálé) származó bizonyos fehérjék és rövid aminosav szekvenciák (epitópok) idéznek elő. A két betegség klinikai tünetei gyakran átfednek, de megkülönböztetésüket és diagnózisukat nehezíti, hogy a patogén lezajlásuk különböző. Mindkét esetben a cél molekuláról (antigénről) meglévő információink hiányosak. A cöliakiát kiváltó fehérjék, elsődlegesen a prolaminok családjába tartoznak. Az allergiáért felelős epitópok a búza prolaminok és az oldható fehérjék között is meglelhetők (1).

A kenyérbúza (*T. aestivum*) és a spelta (*T. spelta*) közötti szoros genetikai kapcsolat ellenére, a spelta búzából készült termékek fogyasztása kedvezőbb toleranciát mutatott a búza allergiában szenvedő betegek körében. Az európai spelta fajták immunglobulin reaktivitását vizsgálva, a különbséget a vízdoldható fehérjék csoportjában találták (2). Hasonló eredményeket kaptak, az ún. GWF, ausztrál spelta genotípus esetében is, melyben az allergiát kiváltó expanszin gén mutációját fedezték fel, lehetőséget látva benne, hogy az ebből készült termékeket az allergiás betegek majd fogyasztathatják (3).

Ezekből a problémákból és lehetőségekből kiindulva olyan projektet építettünk fel, melynek célja, hogy a kenyérbúza és spelta genotípusokban jelenlévő vagy éppen hiányzó IgE-mediált immunreaktív fehérjéket és szekvenciákat azonosítja. A vizsgált európai és ausztrál spelta fajták fehérje összetételét SE-HPLC, RP-HPLC, Lab-on-a-chip technikával és SDS-, A-PAGE és két dimenziós gélelektroforézissel határoztuk meg. Összehasonlítva a búza és spelta prolamin proteómját nem találtunk köztük szignifikáns különbséget, de az oldható fehérjék összetétele között azonban különbség figyelhető meg.

A speltát és a genom donorjait PCR vizsgálattal teszteltük, melyben allergénként azonosított szekvenciákra tervezett primerekkel dolgoztunk (expanszin, alpha-amiláz inhibitor, Tri a 14 (LTP), Tri a 36, HMG fehérje, szerin karboxypeptidáz II, putative leucine-gazdag ismétlődő fehérje,  $\alpha/\beta$ -gliadin, thioredoxin, beta-purothionin, glutation transzferáz, cys-peroxiredoxin, profilin, dehydrin). A különböző spelta fajták és genom donorjaik allergén karakterisztikája között szignifikáns különbségeket azonosítottunk.

Az eddig vizsgálnál még nagyobb számban, allergén szekvencia-specifikus markert használó genetikai tesztek hasznos eszközei lehetnek nemcsak a növénynevelőknek, akik ezek segítségével azonosíthatják azokat a genotípusokat, búzafajtákat, mely az allergiás betegek számára is fogyaszthatók, hanem az élelmiszeripar számára is, akik alapanyagokból és feldolgozott élelmiszerekből kívánják az allergen komponenseket kimutatni.

**Köszönetnyilvánítás:** A marker projekt megvalósulását a Rosztoczy alapítvány tette lehetővé, ezúton is köszönöm a támogatásukat.

## Referenciák:

[1] Juhász A., Gell Gy., Békés F., Balázs E. *Funct. & Integ. Genomics* 12(4): 585–598 (2012)

[2] Klockenbring T., Boese A., Bauer R., Goerlich R., *Food and Agricultural Immunology* 13:171-181 (2001)

[3] Breen M., Li D., Dunn D.S., Békés F., Kong X., Zhang J., Jia J., Wicker T., Mago R., Ma W., Bellgard M., and Appels R. *BMC Plant Biology* 10: 99 (2010)

## **A bemutatott poszterek összefoglalói**

# ADALÉKOLT TiO<sub>2</sub> BEVONATOK FOTOAKTIVITÁSA

**Albert Emőke<sup>1</sup>, Pierre-Antoine Albouy<sup>2</sup>, André Ayrál<sup>3</sup>, Csík Gabriella<sup>4</sup>, Suhajda Ágnes<sup>5</sup>,  
Hórvölgyi Zoltán<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék,  
H-1111 Budapest, Budafoki út 6-8.

<sup>2</sup>Paris-Sud Egyetem, Orsay, Párizs, Franciaország

<sup>3</sup>Európai Membrán Intézet, Montpellier 2 Egyetem, Montpellier, Franciaország

<sup>4</sup>Semmelweis Egyetem, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

<sup>5</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi  
Tanszék

emokealbert@yahoo.com

A munka célja olyan TiO<sub>2</sub> vékonyrétegek előállítása és jellemzése, melyek látható fényben antibakteriális, fotoaktív tulajdonságot mutatnak.

Kompakt és pórusos TiO<sub>2</sub> szol-gél vékonyrétegeket a mártásos szol-gél technikával állítottunk elő mikroszkóp tárgylemez és szilícium hordozó felületeken. A pórusos bevonatok kialakítását kationos felületaktív anyag használatával valósítottuk meg. A bevonatok vastagságát, törésmutatóját és porozitását UV-Vis spektroszkópiás és ellipszometriai porozimetriás (EP) mérések alapján határoztuk meg. A bevonatok szerkezetét pásztázó elektronmikroszkópos (SEM) felvételek alapján tanulmányoztuk. A vékonyrétegek kristályosságát Röntgen diffrakciós (XRD)-, míg összetételüket Röntgen fluorimetriás (XRF) - és Rutherford visszaszórás spektroszkópiás (RBS) mérésekkel tanulmányoztuk.

Látható fényben fotoaktív, antibakteriális bevonatok kialakítására a vékonyrétegeket ezüsttel vagy/és arannyal adalékoltuk, különböző módokon. Az ezüst, illetve arany ionok redukálását hőkezeléssel valósítottuk meg. A bevonatok antibakteriális hatásának tanulmányozására E. Coli baktériumnak a bevonatokkal szembeni ellenállóképességét különböző módszerekkel tanulmányoztuk, sötétben és látható fényben egyaránt.

## **Köszönetnyilvánítás:**

*A szerzők köszönetet mondanak a munkában nyújtott segítségért a következő személyeknek: Hild E., Basa P., Bánkuti A., Becsei T., Deák A., Jancsek R., Nagy N., Pázi K., V. Rouessac, Szabó R., Zolnai Zs.*

*Albert Emőke publikációt megalapozó kutatása a TÁMOP-4.2.4.A/2-11/1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.*

*A munkához anyagi támogatást nyújtott az Új Széchenyi Terv (Társadalmi Megújulás Operatív Program, TÁMOP – 4.2.1/B-09/1/KMR- 2010-0002), és a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség (magyar-francia bilaterális TÉT pályázat, PHONOSEL, Tét\_11-2-2012-0008 és magyar-román bilaterális TÉT pályázat, SOLGELCOR, TÉT\_12\_RO-1-2013-0011).*

# SILICON CARBIDE ALAPÚ FESTÉKPRÓBÁK

**Beke D.<sup>1,2</sup>, Szekrényes Zs.<sup>1</sup>, Pálfi D.<sup>3,4</sup>, Róna G.<sup>5</sup>, Maák P.<sup>6</sup>, Kamarás K<sup>1</sup>, Rózsa B.<sup>3,4</sup>,  
Buday L.<sup>5</sup>, Vértessy B.<sup>5</sup>, and Gali A.<sup>1,6</sup>**

*1 Szilárdtest Fizikai és Optikai Intézet, Wigner Fizikai Kutatóközpont, MTA, Budapest, Magyarország*

*2 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Budapest, Magyarország*

*3 Információ Technológiai Kar, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Budapest, Magyarország*

*4 Kísérleti és Orvostudományi Intézet, MTA, Budapest, Magyarország*

*5 Enzimológiai Intézet, Természettudományi Kutatóközpont MTA, Budapest, Magyarország*

*6 Atomfizikai Tanszék Természettudományi Kar Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Budapest, Magyarország*

*beke.david@wigner.mta.hu*

A biológiai képalkotás meghatározó szerepet kap a biológiai kutatásokban. A képalkotáshoz használt fluoreszcens festékmolekulák, festékpróbák kutatása kiemelt terület. A festékmolekulák mellett megjelentek a fotostabilitásban és kvantum hatásfokban a szerves molekulákat felülmúló kvantumpöttyök, melyek komoly alternatívát jelentek mind az alkalmazott- mind az alapkutatásban. A kvantumpöttyök elsősorban II. és VI., ill. III. és V. főcsoportbeli elemekből előállított vegyületekből készülnek (pl. CdSe, CdTe, InP, InAs). Bár a kvantum pöttyök tulajdonságai sok esetben felülmúlják a tradicionális festékmolekulákét, van néhány hátrányos tulajdonságuk, amik limitálják a felhasználási területeket. A citotoxicitás az egyik legjelentősebb probléma az in vivo vizsgálatokban.

A bemutatásra kerülő szilíciumkarbid kvantumpöttyök nélkülözik a klasszikus kvantumpöttyök hátrányos tulajdonságait, ezáltal meghatározó szereplővé válhatnak a biológiai képalkotásban. A SiC egy kemény, kémiaileg ellenálló széles tiltott sávú indirekt félvezető. A SiC biokompatibilitását már sok kutatócsoport bizonyította. Csoportunk kifejlesztett egy két lépésből álló SiC kvantumpötty előállítási módszert. Először SiC mikrokristályokat állítunk elő a vegyület elemeiből. A módszer alkalmas arra, hogy heteroatomokat is bejuttassunk a SiC mátrixba, ezzel hangolva a mikrokristályokból képzett kvantumpöttyök optikai tulajdonságait. A kvantumpöttyöket nedves kémiai marással állítjuk elő. A SiC klaszterek mérete 3 nm alatti és stabil kolloid rendszert alkotnak vizes közegben köszönhetően a felületen létrejött polarizált szerves csoportoknak. A felületi csoportok vizsgálatát infravörös spektroszkópiával végeztük el. Eredményeink szerint a felületen Si-O-Si, C-O-C, CH valamint COOH és OH csoportok vannak. Ezek a csoportok hidrofíll tulajdonságot kölcsönöznek a SiC-nak és alkalmassá teszik a funkcionálizálásra is.

A SiC kvantumpöttyök toxicitását AlamarBlue Assay módszerrel vizsgáltuk és nem talákoztunk toxikus hatással egészen 200 µg/ml koncentrációig. Festékpróbaként való alkalmazása egyaránt tesztelve lett fluoreszcens mikroszkóp és kétfoton mikroszkóp alatt.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a TÁMOP-4.2.4.A/2-11/1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg

# Új, 2µm alatti szemcseátmérőjű, héjszerű töltetek összehasonlítása

## - Lehetőségek, korlátok -

<sup>1</sup>**Bobály B., D.** <sup>2</sup>**Guillarme, Fekete J., Fekete Sz.**

<sup>1</sup>*Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, , 1111 Budapest  
Szt. Gellért tér 4.*

<sup>2</sup>*Gyógyszerész Tudományok Iskolája, Genfi Egyetem, 1211 Genf 4, Boulevard d'Yvoy 20,  
e-mail.: [bobaly.balazs@gmail.com](mailto:bobaly.balazs@gmail.com)*

Az ultra nagy hatékonyságú kromatográfias technológiák kifejlesztése új lehetőségeket nyitott meg az elválasztás hatékonyságának növelésében, így az analízis idő csökkentésében. A héjszerű töltetek megjelenése a teljesen porózus szemcsékhez képest tovább növelte ezt a hatékonyságot.

A munka célja a legújabb, 2µm alatti szemcseátmérőjű héjszerű töltetek (Kinetex 1,3µm, Kinetex 1,7µm és Cortecs 1,6µm) lehetőségeinek és korlátainak vizsgálata volt. Az összehasonlításhoz izokratikus és gradiens kinetikai teljesítmény, terhelhetőséget, valamint valós minták elválasztása során nyújtott teljesítményt vizsgáltunk. A kísérletekhez kismolekulákat és peptideket használtunk. A Kinetex 1,3µm szemcsék bizonyultak a leghatékonyabbnak ultragyors elválasztások esetében. Hosszabb elválasztások során nagyobb permeabilitásuknak és jobb nyomástűrésüknek ( $\Delta P_{\max}$ : 1200bar) köszönhetően a Cortecs 1,6µm szemcsékkel töltött kolonnák szerepeltek jobban. A terhelhetőséget bázikus és neutrális vegyületekkel vizsgáltuk savas körülmények között. A Cortecs 1,6µm és a Kinetex 1,7µm töltetek terhelhetősége nagyon hasonló, míg a Kinetex 1,3µm töltet 2-7-szer kisebb, mint az előzőeké. Végül a töltetek teljesítményét valós minták elválasztása során kapott eredményekkel mutatjuk be. A hatékonyságot atorvasztatin és szennyezői elválasztásban, valamint peptid térképezés segítségével értékeltük.

A Kinetex 1,3µm rendkívüli kinetikai teljesítményt mutatott, ugyanakkor a leggyakrabban előforduló elválasztási feladatokban a Cortecs 1,6 µm töltet jelentheti az optimális kompromisszumot a hatékonyság és az analízis idő (permeabilitás) között. A Kinetex 1,3µm töltet lehetőségeit nagyobb nyomáson üzemelő (~2000 bar), kisebb kolonnán kívüli zónaszélesedéssel (<1µl<sup>2</sup>) rendelkező készülékek alkalmazásával jobban ki lehetne használni.

### Ref.:

B. Bobály, D. Guillarme, Sz. Fekete, J. Sep. Sci. 2013, DOI: 10.1002/jssc.201301110



# FELÜLETERŐSÍTETT RAMAN TÉRKÉPEZÉS ALKALMAZÁSA TABLETTÁK HATÓANYAG TARTALMÁNAK MEGHATÁROZÁSÁRA

**Firkala Tamás<sup>1</sup>, Farkas Attila<sup>2</sup>, Vajna Balázs<sup>3</sup>, Marosi György<sup>2</sup>, Pokol György<sup>1</sup>,  
Szilágyi Imre Miklós<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>*BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest Szent Gellért tér 4.*

<sup>2</sup>*BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest Budafoki út 8.*

<sup>3</sup>*Accenture Analytics Innovation Centre, 1 Grand Canal Square, Grand Canal Harbour,  
Dublin, Ireland*

<sup>4</sup>*MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport, 1111 Budapest Szent Gellért tér 4.  
firkala.tamas@mail.bme.hu*

Nemesfém nanorészecskéket gyakran használnak spektroszkópiai, és egyéb analitikai célokra. Korábbi kutatásaink során sikeresen alkalmaztunk ezüst kolloid oldatokat felületerősített Raman spektroszkópiában (SERS). Ezt követően az eljárást integráltuk Raman térképezési műveletekbe is.

A felületerősített Raman spektroszkópia lényege, hogy speciálisan kiválasztott próbamolekulák oldatát esetünkben ezüst kolloid oldatával elegyítve, a molekulák adszorbeálódnak a nanorészecskék felületén, emiatt erősen polarizálódnak, és a Raman spektrométer jelét több nagyságrenddel felerősítik. Így az említett vegyületek akár nanomólos koncentrációban is detektálhatók, míg fém nanorészecskék nélkül már jóval kisebb koncentrációban sem lennének észlelhetők.

A Raman térképezés folyamán adott felület pontonkénti végigpásztázása zajlik Raman spektrométerrel. Munkánk során különböző hatóanyag koncentrációjú tabletták felületét vizsgáltunk, a tablettában lévő gyógyszerhatóanyag felületi eloszlásának meghatározása céljából. Ha a hatóanyag felületi koncentrációja egy bizonyos küszöbérték alá kerül, akkor normál Raman térképezéssel már nem vizsgálható a hatóanyag felületi eloszlása.

A felületerősített Raman térképezéshez L-aszkorbinsav – laktóz monohidrát modell tablettákat készítettünk, amelyek hatóanyaga jól adszorbeálódik ezüst nanorészecskék felületén. A modell tabletták felületét ezüst kolloiddal vontuk be, így a hatóanyag felületi eloszlását abban az esetben is jó közelítéssel tudtuk meghatározni, amikor az L-aszkorbinsav felületi koncentrációja a normál Raman mérés érzékelési határa alá került. A kapott térképeket többváltozós görbefelbontást alkalmazó kemometriaival értékeltük ki. Kísérleteink folyamán megállapítottuk, hogy az L-aszkorbinsav felületi eloszlása alapján jó becslés adható a hatóanyag koncentrációjára a teljes tabletták térfogatban.

Megfigyeléseink alapot adhatnak a módszer gyakorlati alkalmazásának kiterjesztéséhez, elsősorban jelenleg is kereskedelmi forgalomban lévő készítmények hasonló célú vizsgálatához.

# A BÚZA GENETIKAI ÉS KÖRNYEZETI VARIABILITÁSÁNAK HATÁSA AZ ELISA MÓDSZERREL TÖRTÉNŐ SIKÉRTARTALOM MEGHATÁROZÁSRA

**Hajas Livia, Török Kitti, Bugyi Zsuzsanna, Tömösközi Sándor**

*Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szent Gellért tér 4, Budapest, Magyarország*  
[hajas.livia@mail.bme.hu](mailto:hajas.livia@mail.bme.hu)

A lisztérzékenység a búza, árpa és rozs tartalékfehérjék bizonyos alegységei által kiváltott rendellenesség, melynek egyetlen kezelési módja, hogy a beteg a tüneteket kiváltó fehérjét számúzi étrendjéből. A 41/2009/EC rendelet értelmében egy élelmiszert gluténmentes jelöléssel lehet ellátni és a lisztérzékenyek számára biztonságosan fogyasztható, ha a glutén tartalma nem haladja meg a 20 mg/kg-os szintet. Gluténmentes élelmiszerekben a glutén mennyiségi meghatározására a Codex Alimentarius az R5 Mendez ELISA módszert javasolja. Az ELISA mérés során a mért gliadin tartalom megduplázásával következtethetünk a mintában jelenlévő sikerfehérjék mennyiségre, feltételezve, hogy a glutén fehérjék felét a prolaminok teszik ki. Azonban a sikerfehérjék mennyiségi összetételében különbségek figyelhetők meg az egyes búzafajtáknál, a prolamin/glutenin arány magasabb mint 1 [1]. A cöliákiát kiváltó epitópokban is eltérések tapasztalhatók az egyes búzafajták között [2]. Habár a sikerfehérjék össz mennyisége és összetétele genetikailag determinált, egyes környezeti tényezők, mint pl. a hőmérséklet, kén és nitrogén ellátottság is befolyásolják expressziójukat [3]. A cöliákiát kiváltó glutén fehérjék heterogén és variábilis molekulák, mely hatással van az ELISA módszerrel kapott eredmények pontosságára. Kutatómunkám célkitűzése a búza genetikai és környezeti variabilitása által okozott hiba becslése volt modellkísérlet segítségével. A genetikai variabilitás vizsgálatához különböző búzafajták keverékéből előállított lisztek felhasználásával azonos elméleti gliadin tartalommal rendelkező modelltermékeket készítettem. Az előállítási folyamat minden lépésénél mintát vettem, így porkeverék, nyers liofilezett tészta és hőkezelt (sütött) tészta gliadin tartalmát is vizsgáltam ELISA módszerrel. Két különböző termőévből származó búzafajták felhasználásával készült modelltermékek mért gliadin tartalmának összehasonlításával értékeltem az évenkénti változékonyságnak az eredményekre gyakorolt hatását. Az egyes faktorok mérési bizonytalanságban játszott szerepének becslésére statisztikai program segítségével varianciaanalízist végeztem. Jelentős eltérés tapasztaltam a különböző búzafajtákból származó lisztek felhasználásával készült modelltermékek mért gliadin tartalmában. Az eredmények eltéréseinek hátterében állhat az ELISA kitek által alkalmazott antitestek eltérő specifikitása és affinitása a különböző búzafajtákhoz. A búza variabilitás által okozott mérési bizonytalanság ismerete elősegíti az ELISA módszerek és glutén referenciaanyagok fejlesztési irányának kijelölését.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatómunkát az EU 6. Keretprogramja által finanszírozott MoniQA Kiválóságshálózat (Monitoring and Quality Assurance in the Food Supply Chain, FOOD-CT-2006-036337) támogatta és kapcsolódik a TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002 projekt szakmai célkitűzéseéhez.

## Referenciák:

- [1] Wieser H., Koehler P. European Food Research and Technology, 229, 9-13 (2009).
- [2] Prandi B., Bencivenni M., Faccini A., Tedeschi T., Dossena A., Marchelli R., Galaverna G., Sforza S. Journal of Cereal Science, 56, 223-231(2012).
- [3] Dupont F. M., Altenbach S. B. Journal of Cereal Science, 38, 133-146 (2003).

# REÁLIS MINTAMÁTRIX ALAPÚ, TÖBB KOMPONENST TARTALMAZÓ REFERENCIAANYAG FEJLESZTÉSE ÉLELMISZERALLERGÉNEK MEGHATÁROZÁSÁHOZ

**Török Kitti, Hajas Livia, Bugyi Zsuzsanna, Tömösközi Sándor**

*Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi  
Egyetem, Szent Gellért tér 4, Budapest, Magyarország  
[hajas.livia@mail.bme.hu](mailto:hajas.livia@mail.bme.hu)*

Az élelmiszerek által kiváltott túlérzékenységi reakciók (allergia, intolerancia) a népesség egyre nagyobb hányadát érintik, mely rendellenességek egyetlen kezelési módja a kiváltó fehérjék eliminálása az étrendből. Ezen komponensek minőségi és mennyiségi meghatározásához megbízható, érvényesített analitikai módszerek szükségesek. Rutin analitikai mérésekhez több módszer is alkalmazható (ELISA, immunblotting, PCR és MS technika), melyek közül legelterjedtebb az ELISA módszertan használata. Azonban a megfelelő referenciaanyagok hiánya nagymértékben nehezíti a módszer validálási folyamatát és pontosságának meghatározását. A több komponens meghatározására alkalmas analitikai módszerek fejlesztésére irányuló kezdeményezések indokoltá tette több túlérzékenységi reakciót kiváltó komponens tartalmazó referenciaanyag létrehozását.

Kutatócsoportunk korábban kidolgozott egy olyan komplex élelmiszer mátrixot, mely deklarált mennyiségben és homogén eloszlásban tartalmazott allergén fehérjét. Ezen referenciaanyag jelölt, feldolgozott mátrix lehetővé tette a feldolgozási folyamat és az élelmiszerkomponensek közötti interakciók fehérjék detektálhatóságára gyakorolt hatásának vizsgálatát. Kutatásaink jelenleg több komponens tartalmazó élelmiszermátrix fejlesztésére és jellemzésére irányul. A túlérzékenységi reakciók előfordulási gyakoriságát figyelembe véve, négy komponensre vontunk be vizsgálatainkba: gliadin, tej, tojás és szója. A korábban kidolgozott referenciaanyag előállítási eljárását alapul véve előállított több fehérje komponensű mátrixot ELISA módszerrel vizsgálva megállapítható, hogy valamennyi fehérje eloszlása homogén, a detektálható fehérje mennyiségben csökkenő tendenciát tapasztaltunk. Az egy és több fehérje komponensű mátrixok összehasonlításával a lehetséges keresztreakciók azonosítása volt a cél. Az egyes esetekben tapasztalt eltérések alapján nem kizárt a keresztreakciók létrejötte, azonban a megfigyelt jelenségek megértéséhez további vizsgálatok szükségesek.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatómunka kapcsolódik a MoniQA Association a TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002 projekt szakmai célkitűzéseéhez.

# A HALLOYSIT NANOCSŐ MINT FUNKCIONÁLIS TÖLTŐANYAG POLIMER NANOKOMPOZITOKBAN

Polyák Péter<sup>1,2</sup>, Hári József<sup>1,2</sup>, Pukánszky Béla<sup>1,2</sup>

<sup>a</sup>BME FKAT MGL, H-1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3. H. ép. I. em

<sup>b</sup>MTA Természettudományi Kutatóközpont, H-1025 Budapest, Pusztaszeri út 59-67, IV. ép.

Napjainkban a polimer nanokompozitok szerkezeti anyagként történő alkalmazása növekvő ütemben valósul meg. Számos polimer nanokompozitból készült termék létezik az autó- és repülőgép iparban, valamint a sportszergyártásban is. Mindezek ellenére a nano méretű töltőanyagokkal kapcsolatos homogenizálási, összeférhetőségi problémák, valamint a mesterséges töltőanyagok ára korlátozza az igazán széleskörű elterjedésüket. [1]. Ezek a problémák újabb töltőanyagok fejlesztését célzó kutatásokat katalizálnak. A halloysit (HNT) ásvány a kaolinhoz hasonló kémiai összetételű, természetben előforduló, 1:1 típusú rétegszilikát, mely nanocsöves morfológiával rendelkezik. A csövek mérete széles határok között változhat, külső átmérőjük 30-200 nm, míg hosszuk 200-3000nm is lehet [2].

A HNT egyedülálló tulajdonság kombinációjának köszönhetően (nagy alaki tényező, viszonylag kis mennyiségű hidroxil csoport a külső felületen, üreges szerkezet) számos potenciális alkalmazási területtel rendelkezik, a polimer kompozitok erősítése, hatóanyag leadó rendszerek fejlesztése vagy a csomagolás technológia területén. Ezek alapján a halloysit nanocső alkalmas erősítő anyaga lehet polimereknek, de ezzel egyidejűleg aktív komponensek bevitelére is lehetőséget teremthet. Jelenlegi munkánk célja a HNT széleskörű jellemzése és egy természetes antioxidáns (kvercetin) adszorpciójának/deszorpciójának vizsgálata az ásvány felületén. Az antioxidánssal módosított halloysit nanocsövek (Q-HNT) jellemzését követően polietilén/Q-HNT kompozitokat készítettünk extrúzióval, annak érdekében, hogy tanulmányozzuk az antioxidáns és a töltőanyag polimer tulajdonságokra gyakorolt hatását.

## **Köszönetnyilvánítás:**

A szerzők köszönettel tartoznak az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramnak a pénzügyi támogatásáért (OTKA 101124), valamint az Applied Minerals-nak a kísérletek során felhasznált halloysit ásvány felajánlásáért.

## **Hivatkozások:**

1. K. Myer, in Applied Plastics Engineering Handbook, Processing and Materials, Chap. 8, p. 109. Elsevier, USA, 2011.
2. E. Joussein, S. Petit, J. Churchman, B. Theng, D. Righi, D. Delvaux, Clay Miner. 40, 383 (2005).

# DROTAVERIN SÓK KRISTÁLYOS FÁZISÁNAK TERVEZÉSE

**Holczbauer Tamás, Szabó Máté, Czugler Mátyás**

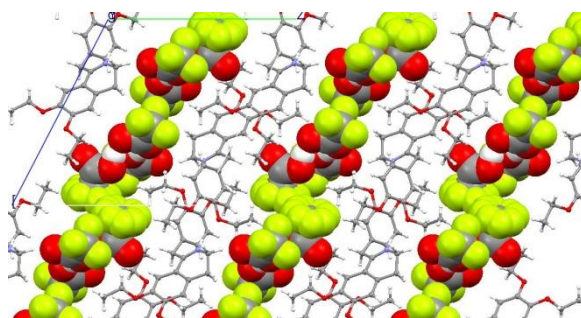
*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet,*

*Budapest 1025, Pusztaszeri út 59-67.*

*E-mail: holczbauer.tamas@ttk.mta.hu*

A drotaverin sók ismertek jó zárványképző tulajdonságaikról. A gyógyszerhatóanyag példáján keresztül mutatjuk be, mennyire fontos a szilárd fázisú anyagok zárványképző hajlamát megismerni és feltárni további kristályszerkezetek jóslása céljából. A szilárd fázisú társulások szerkezete jól vizsgálható egykristály röntgendiffrakcióval.

Drotaverin hidrokloridból kiindulva előállítottunk másfél tucat kristályt, nagyoobbrészt oldószer zárványokat és kokristályokat. Előállítottuk a drotaverin eddig ismeretlen hidroklorid mentes zárványát. Néhány esetben anion metatézis játszódtott le a kristályosítás során. Egykristályban stabilizáltunk peroxid vegyületet.



1. ábra A trifluoroacetát és trifluorecetsav rétegbe rendeződik, ahol az elleniont a protonált drotaverin adja. A két réteg között nincs klasszikus hidrogénhíd.

A kristályok szisztematikus előállítása és vizsgálata elősegíti a gyógyszer-hatóanyag megfelelő kristályformájának kiválasztását és formulázását. Lehetőséget nyújt a jellemző konformációk, a konformációs mozgások megállapítására, illetve felderíti a másodrendű kölcsönhatásokat. Mindezen ismeretek segítenek a lehetséges kristályosító partnerek kiválasztásában.

## **Irodalom:**

[1] Z. Böcskei, K. Simon, A. Friesz, I. Hermecz, **C51**, *Acta Cryst.* 1587 (1995).

[2] K. Simon, A. Friesz, I. Hermecz, **69**, *Acta Pharm. Hung.* 24 (1999).

[3] J. I. Arenas-García, D. Herrera-Ruiz, K. Mondragon-Vasquez, Morales-Rojas, H. Höpfl, *Cryst. Growth Des.* **10**, 3732 (2010).

[4] J. C. Espinosa-Lara, D. Guzman-Villanueva, J. I. Arenas-García, D. Herrera-Ruiz, J. Rivera-Islas, P. Roman-Bravo, H. Morales-Rojas, H. Höpfl, *Crystal Growth & Design*, **13**, 169 (2013).

# A HASADÓ ÉLESZTŐ Agn1p (ENDO- $\alpha$ -(1,3)-GLÜKANÁZ) SEJTSZEPARÁCIÓS FEHÉRJÉJÉNEK FILOGENETIKAI ANALÍZISE

Horváth Anna<sup>1</sup>, Sipiczki Mátyás<sup>2</sup>, Sveiczter Ákos<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék, Budapest, Szt. Gellért tér 4.

<sup>2</sup>Debreceni Egyetem, Genetikai és Alkalmazott Mikrobiológiai Tanszék, Debrecen, Egyetem tér 1.  
horvath.anna11@gmail.com

A hasadó élesztőként ismert *Schizosaccharomyces pombe* és közeli rokona, a *S. japonicus* a sejtszeparáció tanulmányozásának kedvelt modellorganizmusai. Sejtosztódás előtt a gombáknak meg kell szintetizálniuk az új sejtfalet (szeptum). A hasadó élesztő Agn1 fehérjéje egy endo- $\alpha$ -(1,3)-glükánáz, amelynek fontos szerepe van a sejtszeparációban, hiszen a szeptum szegélyt (elsődleges szeptumot szegélyező sejtfalet részlet) hidrolizálja.

Számos Ascomycota és Basidiomycota faj homológjainak felhasználásával végeztük el a fehérje filogenetikai analízisét. A homológok megtalálásához Blastp keresést végeztünk több adatbázisban (NCBI, JGI, BROAD). Meglepő, hogy több faj (pl: *Aspergillus* fajok) több mint 4 homológot tartalmaz, ugyanakkor a megszekvenált Saccharomycotina fajokban nem találtunk homológot, melynek vélhetően az eltérő sejtfaletösszetétel lehet az oka. A kapott homológok szekvenciáit globális illesztéssel (Needleman-Wunsch módszerrel) hasonlítottuk össze a *S. pombe* Agn1p szekvenciájával. Az alacsony pontszámú találatokat további vizsgálatainkhoz nem használtuk. A glikozil-hidroláz 71-es domén szekvenciájának azonosításához keresést végeztünk a Pfam adatbázisban. A későbbi filogenetikai analízisekhez ezeket a doménszekvenciákat használtuk. Többszörös illesztéseket végeztünk a Clustalw, a Prank és a Mafft módszerekkel. A törzsfákat különböző módszerekkel készítettük el (Neighbor Joining, Maximum parsimony, Maximum likelihood, Bayesi megközelítés), melyhez a MEGA, a Phylip és a MrBayes programokat használtuk.

A kapott fák topológiája ugyan kismértékű különbségeket mutat, de megállapítható, hogy a filogenetikai fa alapján az *Schizosaccharomyces* nemzetség Agn1 homológjai a Basidiomycota fajok homológjainak közelebbi rokonai lehetnek, mint az Ascomycotákénak. Ennek oka vélhetően a különböző sejtfaletösszetétel, a *Schizosaccharomyces* nemzetség sejtfalet jobban hasonlít a Basidiomycotákéhoz, mint az Ascomycotákéhoz.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönjük Kovács M. Gábornak és Ortutay Csabának hasznos szakmai észrevételeiket és tanácsaikat. A projekt megvalósítását az OTKA K-101323 programja támogatja.

# A MOLEKULASZERKEZET ÉS A GÓCKÉPZÉS HATÁSA HOMO- ÉS RANDOM POLIPROPILÉN MINTÁK OPTIKAI TULAJDONSÁGÁRA

**Horváth Zsuzsanna<sup>1,2</sup>, Menyhárd Alfréd<sup>1,2</sup>, Doshev Petar<sup>3</sup>, Gahleitner Markus<sup>3</sup>,  
Vörös György<sup>1</sup>, Varga József<sup>1,2</sup>, Pukánszky Béla<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudomány Tanszék, Műanyag és Gumiipari Laboratórium, H-1111 Budapest XI. Műegyetem rkp. 3. H ép. I.*

<sup>2</sup>*Magyar Tudományos Akadémia, Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, 1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.*

<sup>3</sup>*Borealis Polyolefin GmbH, St.-Peter-Strasse 25, 4021 Linz, Austria*

Néhány műanyagból készült termék esetében az átlátszóság és optikai tisztaság már alapkövetelmény és ez az igény folyamatosan növekszik az iparban. Poliolefinek esetében a beeső fény szóródik a kristályos egységeken, szferolitokon, és az amorf és kristályos rész határfelületén a fázisok különböző törésmutatója következtében, ezért nem lesznek átlátszóak a termékek. A polimerek optikai tulajdonságát a homályosság (haze) értékkel jellemezhetjük, amely az áthaladt, és visszaszórt fény intenzitásából számítható ki. Manapság polipropilén termékeket is egyre nagyobb számban alkalmaznak, mert jó átlátszóság érhető el velük alacsony ár mellett. Ezekhez általában random kopolimereket használnak, és *clarifier*-ekkel tovább javítják az optikai jellemzőket. Ezek az adalékanyagok/segédanyagok részlegesen oldódnak a polimerben, így mikrokristályos szerkezetet hoznak létre, amely jelentősen javítja az átlátszóságot. A *clarifier*-ek hatékonysága nagymértékben függ az alkalmazott polimer jellemzőitől, és a feldolgozás körülményeitől. A kutatásunk célja, hogy összefüggést találjunk a homo- és random polipropilén molekulaszervezete és a belőlük készült termékek optikai tulajdonsága között. A homályosságot vetettük össze a kristályos szerkezettel, és egy modellt állítottunk fel, amely mennyiségileg képes leírni ezt az összefüggést, valamint kapcsolatot teremt a vizsgált polimerek optikai tulajdonsága és molekulaszervezete között.

Kilenc különböző polipropilént vizsgáltunk, két homo, és hét random kopolimert. A minták etilén tartalma 0 és 5,3 % között volt. Az optikai tulajdonságokat két oldódó gócképzővel (Millad NX 8000, XT 386) változtattuk, amelyeket egy viszonylag széles tartományban különböző koncentrációkban alkalmaztunk. A molekulaszervezetet, pontosabban a láncszabályosságot lépcsős izoterm kristályosítási technikával (SIST) jellemeztük. A minták olvadási és kristályosodási jellemzőit differenciális pásztázó kalorimetriával (DSC) határoztuk meg. A lamella vastagság eloszlást és az átlagos lamella vastagságot a második fűtésből számítottuk ki. Az optikai tulajdonságok jellemzésére 1 mm vastag fröccsöntött lapokon homályosság vizsgálatot végeztünk.

Az eredmények alapján elmondható, hogy a lamellavastagság és a kristályosság csak kis mértékű hatást gyakorol az átlátszóságra. A bevezetett modell mennyiségileg képes leírni a homályosság és a gócképzés hatékonyságának függését az adalékanyag koncentrációjától, és feltételezi, hogy ugyanazok a tényezők vannak hatással a kristályosodás csúcshőmérsékletére, és az optikai tulajdonságokra. Az eredmények tanulmányozása bizonyította ezt a feltevést, és feltárta, hogy a tulajdonságokat meghatározó legfontosabb tényező, a szupermolekuláris egységek mérete. A model paraméterei függenek a polimer molekulaszervezetétől. A láncszabályosság meghatározza a szupermolekuláris szerkezetet és így a gócképzés hatását az optikai tulajdonságokra.

# Imidazólium-actát ionos folyadékok – új lehetőségek

**Kelemen Zsolt,<sup>a</sup> Hollóczki Oldamur,<sup>a</sup> Péter-Szabó Barbara,<sup>b</sup> Székely Edit,<sup>b</sup>  
Nagy József<sup>c</sup>, Nyulászi László<sup>a\*</sup>**

*a Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*

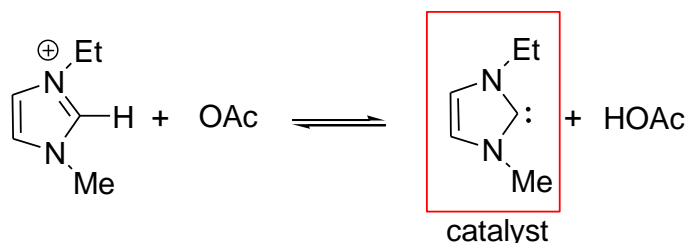
*b Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék*

*c Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szt Gellért tér 4. H-1111 Budapest*

*kelemen.zsolt@mail.bme.hu*

Imidazólium-acetát ionos folyadékok (pl 1-etil-3-metilimidazólium-acetát) napjainkban intenzíven kutatott vegyületek, köszönhetően számos alkalmazhatóságuknak, mint például a cellulóz feldolgozásnál vagy a szén-dioxid megkötésénél. Fontos tulajdonsága ezeknek az ionos folyadékoknak, hogy az imidazólium kationból levezethető nitrogén heterociklusos karbén (NHC) bázicitása összemérhető az acetát anionéval. Annak ellenére, hogy a karbének jelenléte egyértelműen bizonyított, e tényből nem következik [3], hogy folyadékfázisban a koncentráció megfelelően nagy ahhoz hogy organokatalitikus hatást figyelhessünk meg.



**1. ábra:** Karbén keletkezése EMIM-Ac ionos folyadékban

**2.**

A bemutatott munka célja az EMIM-Ac organokatalitikus hatásának vizsgálata [4], továbbá a szén-dioxid viselkedése a különböző körülmények között a fenti ionos folyadékban.

## Hivatkozások:

[1] a) Sun, N.; Jiang, X.; L., M. M.; Metlen, A.; Rogers, R. D. ChemSusChem **2011**, *4*, 65–73. b, b, H. Wang, G. Gurau, Robin D. Rogers Chem. Soc. Rev., **2012**, *41*, 1519-1537

[2] a) X. Zhang, X. Zhang, H. Dong, Z. Zhao, S. Zhang, Y. Huang, Energy Environ. Sci. 2012, *5*, 6668 – 6681;

b) F. Jutz, J.-M. Andanson, A. Baiker Chem. Rev. **2011**, *111*, 322-353 c, J. F. Brennecke, B. E. Gurkan, J. Phys. Chem. Lett. **2010**, *1*, 3459 – 3464

[3] a) O. Hollóczki, D. Gerhard, K. Massone, L. Szarvas, B. Németh, T. Veszprémi and L. Nyulászi, New J. Chem., **2010**, *34*, 3004. b) G. Gurau, H. Rodriguez, S. P. Kelley, P. Janiczek, R. S. Kalb, R. D. Rogers Angew. Chem. Int. Ed. **2011**, *50*, 12024 –12026 c) H. Rodríguez, G. Gurau, J. D. Holbrey, R. D. Rogers, Chem. Commun., **2011**, *47*, 3222.

[4] Z. Kelemen, O. Hollóczki, J. Nagy, L. Nyulászi Org. Biomol. Chem., **2011**, *9*, 5362-5364.



# A WNT INHIBITORY FACTOR-1 FEHÉRJE WIF DOMÉNJÉNEK WNT-KÖTŐ FELSZÍNÉNEK JELLEMZÉSE

Bányai László, Kerekes Krisztina, Patthy László

MTA TTK Enzimológiai Intézet H-1113 Budapest, Karolina út 29; [kerekes.krisztina@ttk.mta.hu](mailto:kerekes.krisztina@ttk.mta.hu)

A Wnt fehérjék nagyméretű glikozilált, palmitoilált extracelluláris molekulák, melyek kulcsszerepet töltenek be az embrionális fejlődésben és az összejt proliferációban. A Wnt-k különböző intracelluláris jelátviteli útvonalak aktiválásán keresztül fejtik ki hatásukat. A Wnt -  $\beta$ -katenin útvonal esetében a Wnt a Frizzled-típusú receptorokkal valamint az 5-ös és 6-os kis sűrűségű lipoprotein receptor-kapcsolt fehérjékkel (LRP5/6) hármas komplexet alkot. A Wnt fehérjék szerkezetéről a közelmúltig keveset tudtunk, de az már egy ideje világos volt, hogy aktivitásukhoz elengedhetetlen a zsírsavas módosítás.

A Wnt-k aktivitását számos szekretált extracelluláris molekula szabályozza, melyek a Wnt-receptor komplex kialakulását befolyásolják. Egyes szabályozó molekulák a receptorokhoz kapcsolódnak, míg a *Wnt-inhibitory factor-1* magához a Wnt-hez kötődik, így akadályozva a receptor komplex kialakulását. Ezen Wnt-antagonisták szöveti homeosztázis fenntartásában betöltött jelentős szerepét mutatja, hogy a *Wnt-inhibitory factor-1* és az oldható Frizzled-szerű fehérjék epigenetikus csendesítése a Wnt -  $\beta$ -katenin útvonal - különböző rákos megbetegedéseknél megfigyelhető - kóros túlműködését eredményezi. Az említett fehérjék expressziós szintjének helyreállítása akadályozza a tumor fejlődését.

Korábbi vizsgálataink során sikerült a WIF-1 fehérje WIF doménjének 3D NMR szerkezetét és a Wnt-kötésért nagy valószínűséggel felelős alkil-kötő felszínét feltárni. [1] Ezen eredményeket alapul véve, a *Wnt inhibitory factor-1* fehérje WIF doménjének Wnt-kötő felszínének lokalizálásához arginin-szkenning mutagenézist felületi plazmon-rezonancia *assay*-vel társítva alkalmaztunk. Az a megfigyelésünk, hogy az alkil-kötő felszín bizonyos aminosav-oldalláncainak lecserélése növelte a WIF Wnt5a-hoz való affinitását, viszont a Wnt3a-hoz való affinitását csökkentette, arra enged következtetni, hogy ezen oldalláncok határozzák meg a WIF különböző Wnt fehérjékhez való kötődésének specifikusát. Ezen eredmények lehetővé tehetik a Wnt család tagjainak - és ezen keresztül a jelátviteli útvonal kóros túlműködésének - különböző WIF variánsokkal célzottabban történő gátlását a különböző rákos megbetegedések esetén.

A közelmúlt vizsgálataink azt mutatták, hogy a Wnt fehérjék szokatlan „kéz”-szerű szerkezettel rendelkeznek, mely a „hüvely- és mutatóujjal” megragadja a Frizzled-receptorokat, azok két kötőfelszínéhez kapcsolódva.[2] Feltételezhető, hogy a Wntk hasonló módon, két kötőhelyen kapcsolódnak a WIF fehérjével is, így az arginin-szkenning mutagenézis vizsgálatainkat a Wnt inhibitory factor-1 fehérje WIF doménjének másik Wnt-kötő felszínének feltárása céljából tovább folytatjuk.

## Irodalom:

- [1] E. Liepinsh, L. Banyai, L. Patthy, G. Otting, *J.Mol.Biol.* 357: 942-950 (2006)
- [2] C.Y. Janda, D. Waghray, K. Ch. Garcia, *Science*; 337 (6090):59-64 (2012 Jul 6)

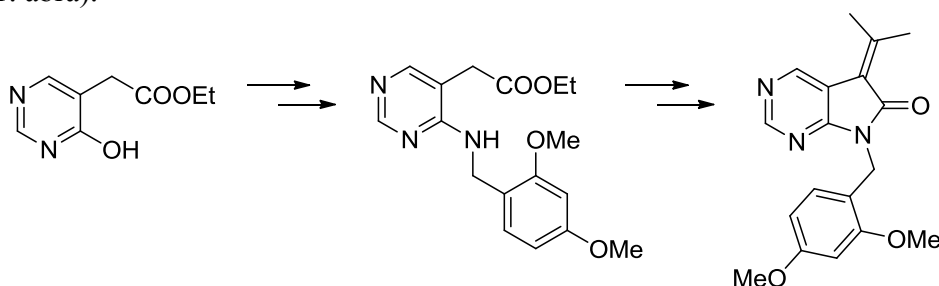
# A PIRROLOPIRIMIDIN VÁZ SZINTÉZISE TANDEM-GYŰRŰZÁRÁSI REAKCIÓVAL

Kókai Eszter<sup>1</sup>, Volk Balázs<sup>2</sup>, Nagy József<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék  
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3, ekokai@mail.bme.hu

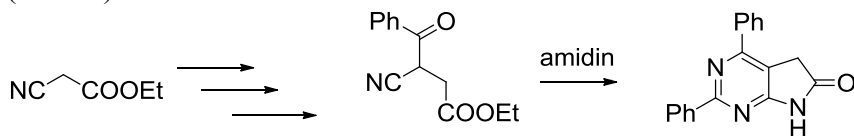
<sup>2</sup>Egis Gyógyszergyár Nyrt., Kémiai Kutatási Főosztály, 1106 Budapest, Keresztúri út 30-38

Az elmúlt évtizedekben számos publikáció jelent meg a pirrolopirimidin származékok biológiai hatásairól, mint például kiváló antitumor hatású protein kináz inhibitorok [1,2]. Kutatásunk során pirrolopirimidin alapvázat tartalmazó heterociklusos vegyületek előállítását tűztük ki célul. Elsőként a 7-es helyzetben könnyen kezelhető védőcsoportot tartalmazó alapvázat alakítottuk ki, így a 2,4-helyzetben szubsztituálatlan és 5-helyzetben különbözőképpen szubsztituálható pirrolopirimidin származékok szintetizálhatók. Az általunk használt 7(N)-védőcsoport a 2,4-dimetoxibenzil volt, mely a katalitikus hidrogénezésnek ellenáll, de savas körülmények között, illetve oxidatív úton eltávolítható. A szintézis során először az alapvázat alakítottuk ki, majd a védőcsoport eltávolítása előtt az 5(C)-helyzetben alkileztünk (1. ábra).



1. ábra

Másik célunk volt, hogy egy olyan eljárást is kidolgozzunk, melyben a 2,4-helyzet különbözőképpen szubsztituálható és az 5-ös helyzet szubsztituálatlan marad. Ezt egy új típusú tandem-gyűrűzárással oldottunk meg, melyet etil-(3-ciano-4-fenil-4-oxobutanoát) modellvegyületet felhasználva valósítottunk meg. Ilyen jellegű gyűrűzárásra az irodalomban még nincs példa (2. ábra).



2. ábra

## Irodalmi hivatkozás:

[1] Akimoto, H., T. Hitaka, et al. *US 4,997,838A* (1991)

[2] Cui, J., K. Hirth, et al. *US 0,183,319 A1* (2002)

# ARILBORONSAVAK ÉS FENOLOK RÉZ-KATALIZÁLT KAPCSOLÁSI REAKCIÓJÁNAK SZÁMÍTÁSOS KÉMIAI VIZSGÁLATA

**Komjáti Balázs, Szokol Bianka, Poppe László, Nagy József**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémiai és Technológia Tanszék, 1111 Budapest,  
Műegyetem rkp. 3.  
bkomjati@mail.bme.hu*

A természetes, biológiailag aktív anyagok, például pajzsmirigy hormonok, antibiotikumok, tumor ellenes alkaloidok között számos diaril-éter található, így előállításuk fontos feladat. A már hosszú ideje ismert *Ulmann* éter-szintézisben fenolok arilezhető erélyes körülmények között, de a reakciónak kicsi a funkciós csoport toleranciája és racemizációt is okozhat. *Evans és mtsai.* 1998-ban publikálták diaril-éterek új szintézismódszerét, melyet arilboronsavak és fenolok réz-katalizálta kapcsolásával valósítottak meg. A reakció mechanizmusát még ma is vita övezi.

A reakció mechanizmusának lényeges kérdése a réz reakció során bekövetkező oxidációsállapot-változásai. A jelenleg feltételezett mechanizmus szerint a redukív elimináció csak réz(III)-komplexről történhet és réz(I)-komplex a terméke. A réz(III)-közttermékek bizonyítását nehezíti, hogy csak ritkán izolálhatók, és réz(II)-vegyületek mellett kimutatásuk majdnem lehetetlen. Létezésük indirekt bizonyítékként szolgálhatnak a számításos kémiai vizsgálatok.

Kutatócsoportunkban néhány egyszerű modellszubsztráttal a reakció-mechanizmus alapos modellezését végeztük el. A számításokat B3LYP és M06 funkcionálokkal 6-31+G\*\* bázison Gaussian 09 programcsomaggal a BME Szuperszámítógépén végeztük. Az elvégzett számítások alátámasztják az eddigi feltételezéseket, a réz(III)-komplexből történő redukív elimináció mind termodinamikailag mind kinetikusan kedvezőbb, mint a réz(II)-komplex esetén.

# KÉTPARAMÉTERES DUPLA-HIBRID FUNKCIONÁL KIFEJLESZÉTE CIRKULÁRIS DIKROIZMUS SPEKTRUM PONTOS BECSLÉSÉHEZ

**Komjáti Balázs, Nagy József**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémiai és Technológia Tanszék, 1111 Budapest,*

*Műegyetem rkp. 3.*

*bkomjati@mail.bme.hu*

A cirkuláris dikroizmus spektroszkópia egy hasznos eszköz királis molekulák tanulmányozására. Gerjesztett állapotok kvantumkémiai számításával az CD spektrum megbecsülhető. A számított és mért spektrum összehasonlítása lehetővé teszi molekulák abszolút konfigurációjának meghatározását. Az EOM-CCSD számítások eredménye rendszerint jól illeszkedik gázfázisban mért adatokhoz, de a számítási igénye miatt csak viszonylag kis molekulák esetén használható. A TD-DFT módszerek kevésbé pontosak, de akár néhány 100 atomos molekulák is tanulmányozhatók. A modern hibrid funkcionálok a rendszerint CCSD(T) szinten számolt kinetikai és termokémiai adatok reprodukálásra paraméterezik, gerjesztett állapotok (főleg ECD) pontosságát a fejlesztéskor nem veszik figyelembe.

Jelen munkánkban bemutatjuk az első ECD spektrum becslésre paraméterezett dupla-hibrid funkcionált. Új funkcionálunk, a TPSS-ECD 45% HF kicserélődést, 55% TPSS kicserélődést 100% TPSS korrelációt és 12% CIS(D) gerjesztési energia korrekciót tartalmaz. A TPSS-ECD számítási igénye a hatékony RI közelítésnek köszönhetően csak kicsit nagyobb a szokványos funkcionáloknál és töredéke az EOM-CCSD-ének.

A módszerek pontosságát kis szerves molekulákon mutatjuk be. B3LYP-hez és más szokványos funkcionálokhoz képest a TPSS-ECD pontosabb gerjesztési energiákat, rotátor erősségeket, előjeleket és összességében helyes görbe alakokat szolgáltat.

## Redox és pH érzékeny poli(aszparaginsav) nanogélek

**Krisch E.<sup>1</sup>, L. Messenger<sup>2</sup>, Gyarmati B. S.<sup>1</sup>, V. Ravaine<sup>2</sup>, Szilágyi A.<sup>1</sup>**

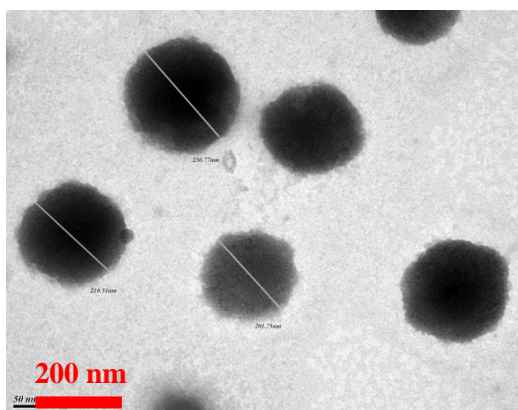
<sup>1</sup>*Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budafoki út. 8  
E-mail: softmatter@mail.bme.hu*

<sup>2</sup>*Université de Bordeaux, ISM, UMR 5255, ENSCBP, 16 avenue Pey Berland, 33607 Pessac, France;  
E-mail: vravaine@enscbp.fr*

A rezponzív, biológiailag lebontható nanogélek az elmúlt évek kutatásai alapján az egyik legígéretesebb nanoméretű hatóanyag-leadó rendszernek bizonyultak. Különleges szerkezetükből adódóan ötvözik a hidrogélek és a nanorészecskék előnyös tulajdonságait, így hatékonyan valósítható meg általuk célzott, szabályozott hatóanyag-leadás [1].

Kutatásunk fő célja redox és pH érzékenységet mutató poli(aszparaginsav) nanogélek előállítását volt. Multirezponzivitásukból adódóan a hatóanyag leadása célzottan a sejtekben történik, kihasználva az extra- és intracelluláris mátrix, illetve az egészséges és rákos sejtek eltérő kémiai környezetét. A nanogél védi a hatóanyagot a véráramban történő keringés során, majd a sejtbe jutva leadja azt.

A poli(aszparaginsav) gélek előállítása vizes közegben történik ciszteaminnal módosított poli(aszparaginsav) oxidációjával [2]. A diszulfid kötéseknek köszönhetően ezen gélek reverzibilis szol-gél-szol átalakulást mutatnak oxidáció, majd ismételt redukció hatására. A nanogéleket víz az olajban típusú emulzióban állítottuk elő, vizsgálatuk dinamikus fényszóródásméréssel, zeta potenciál méréssel, és transzmissziós elektronmikroszkóppal (1. ábra) történt.



1. Ábra: Ciszteaminnal keresztkötött poli(aszparaginsav) nanogélek (TEM)

**Köszönetnyilvánítás:** OTKA (PD76401), Új Széchenyi Terv (TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0009), Bolyai János Kutatási Ösztöndíj.

[1] K. Raendonck, J. Demeester, S. De Smedt, *Soft matter*, **2009**, 5, 707

[2] B. Gyarmati, B. Vajna, Á. Némethy, K. László, A. Szilágyi, *Macromolecular Bioscience*, **2013**, 13, 633

# LIGNOSZULFONÁT SZERKEZETÉNEK SZEREPE POLIMER KEVERÉKEKBEN

Romhányi Vivien <sup>1</sup>, Kun Dávid <sup>1</sup>, Pukánszky Béla <sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
Műegyetem rkp. 3., H épület, I. emelet, Budapest, Magyarország  
kun.david@mail.bme.hu

A lignoszulfonát, azaz szulfonált lignin az úgynevezett szulfitos eljárás mellékterméke, amely a második legelterjedtebb fafeltárási technológia a papíriparban. Ezért a lignoszulfonát alacsony áron és nagy mennyiségben beszerezhető, ami nagyon vonzóvá teszi a hasznosítását. A lignoszulfonát összetett szerkezete és a benne található funkciós csoportok nagyszámú kölcsönhatás létrejöttét eredményezik, amelyek kialakulhatnak a lignin molekulák között, valamint egyéb molekulákhoz kapcsolódva is. Ionos kötések, hidrogénhidak, valamint a  $\pi$  elektronok között ható kölcsönhatások egyaránt felléphetnek a lignoszulfonátokban.

A munkánk során a polimer/lignoszulfonát keverékekben fellépő határfelületi kölcsönhatásokat tanulmányoztuk, ezért nátrium-lignoszulfonátot homogenizáltunk ömledék állapotban különböző polimerekkel (polipropilén, politejsav, polisztirol, poli(etilén-tereftalát) és cink-hidroxiddal részlegesen semlegesített etilén/metakrilsav kopolimer, azaz ionomer) egy belső keverőben. Ezt követően lapokat préseltünk a keverékekből. A lapokból kivágott próbatesten szakítóvizsgálatot alkalmaztunk, hogy meghatározzuk a keverékek mechanikai tulajdonságait, majd a kölcsönhatásokat mennyiségileg becsültük a nyakképződési feszültség és a szakítószilárdság összetételüggéséből [1, 2]. A szakítóvizsgálat során mértük a keverékek akusztikus emisszióját, mivel a mikromechanikai deformációs folyamatok gyakran okoznak akusztikus jeleket a terhelésnek kitett anyagban. Emellett pásztázó elektronmikroszkópiát alkalmaztunk a keverékek morfológiájának tanulmányozására.

Szoros összefüggést találtunk a határfelületi kölcsönhatások erőssége, valamint a lignoszulfonát szemcsék mérete között, amely szerint minél erősebb az adhézió, annál kisebbek a diszpergált szemcsék. A határfelületi adhézió erősségét befolyásolja a polimer mátrix típusa, mivel a lignoszulfonát eltérő kölcsönhatásokat hoz létre a keverékekben. Az ionomer/lignoszulfonát keverékekben a legerősebb az adhézió, ahol só- és hidrogénhidak, valamint kation- $\pi$  elektron kölcsönhatások jönnek létre. A polipropilén/lignoszulfonát keverékekben a leggyengébb az adhézió, ahol csupán gyenge, van der Waals kölcsönhatások alakulnak ki. Az akusztikus emissziós vizsgálatok alapján szintén szoros összefüggés van a mikroszkopikus és makroszkopikus tulajdonságok között, miszerint a mikromechanikai deformációs folyamatok megindulása befolyásolja a keverékek tönkremenetelét.

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönetüket fejezik ki a Forbioplast (212239) FP7 keretprogram, valamint a K 101124 szerződés számú OTKA pályázat anyagi támogatásáért.

## Hivatkozások:

- [1] B. Turcsányi, B. Pukánszky, F. Tüdős, J. Mater. Sci. Lett., 7, 160 (1988)
- [2] B. Pukánszky, Composites, 21, 255 (1990)

# KATION- $\pi$ KÖLCSÖNHATÁSOK VIZSGÁLATA KVANTUMKÉMIAI (QM) ÉS KOMBINÁLT KVANTUMKÉMIAI ÉS MOLEKULAMECHANIKAI (QM/MM) MÓDSZEREKKEL

Lábas Anikó, Krámos Balázs, Oláh Julianna\*

Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
1111 Budapest Szent Gellért tér 4.  
e-mail: labasaniko@gmail.com

A kation- $\pi$  kölcsönhatás egy másodrendű molekuláris kölcsönhatás, melynek során valamely pozitív töltéssel rendelkező molekula vagy molekularész hat kölcsön egy aromás gyűrűt tartalmazó molekulával.<sup>1</sup> A kötési energiája jelentős, nagysága összemérhető a hidrogén-kötés és a sóhíd erősségével.<sup>2</sup> Fontos szerepet játszik a biológiai rendszerekben, többek között elősegíti a fehérjék harmadlagos szerkezetének kialakulását, befolyásolhatja egyes ligandumok felismerését és elősegítheti azok aktív zsebbe történő bekötődését is, például a kolinkötő enzimeknél.

Ezek közé tartozik a malária kórokozójának, a *P. falciparum*nak a CTP: foszfokolin citidiltranszferáz enzimeje (*PfCCT*), amely a membránszintézisben játszik kulcsszerepet: foszfokolinból és citozin-trifoszfátból citidil-foszfokolint állít elő nukleofil szubsztitúciós ( $S_N2$ ) reakcióval.<sup>3</sup> A CCT enzim a ligandumjait egy erősen konzervált zsebben köti meg számos másodrendű kölcsönhatással stabilizálva azokat, többek között kation- $\pi$  kölcsönhatásokkal. Laboratóriumi mutációs kísérletekben bebizonyították, hogy a *PfCCT* enzim ligandumkötő üregét felépítő aminosavak közül a Trp692 oldalláncnak kulcsszerepe van a foszfokolin és a termék megkötésében: mutációja Tyr, Phe, Ala aminosavakra csökkentette az enzim aktivitását, és gyengítette az enzim és a termék közötti kölcsönhatást.<sup>4</sup>

Munkánk során a *PfCCT* enzim variánsok és az enzim terméke között kialakuló kation- $\pi$  kölcsönhatások erősségét határoztuk meg QM/MM számításokkal, és megvizsgáltuk az aromás zsebet felépítő aminosavak szerepét kvantumkémiai és QM/MM módszerekkel, hogy értelmezni és számszerűsíteni tudjuk a kísérleti munka során a mutánsokkal mért termodinamikai paramétereket. Az enzim pontos működésének megértése közelebb vihet bennünket egy új, malária ellenes szer kifejlesztéséhez.

A munka az alábbi támogatók segítségével valósult meg: Új Széchenyi Terv (TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0009) és Richter Gedeon Nyrt.

## Referenciák

1. Zacharias, N., and Dougherty, D. A. (2002) *Trends Pharmacol Sci* 23, 281-287.
2. Gallivan, J. P., and Dougherty, D. A. (1999) *Proc Natl Acad Sci U S A* 96, 9459-9464.
3. Kwak, B. Y., Zhang, Y. M., Yun, M., Heath, R. J., Rock, C. O., Jackowski, S., and Park, H. W. (2002) *J Biol Chem* 277, 4343-4350.
4. Nagy, G. N., Marton, L., Chis, L., Varga, Á. N., Révész, Á., Vékey, K., Irimie, F. D., Vial, H., Cerdan, R., and Vértessy, B. G., *publikálás alatt*

# SZABÁLYOZOTT SZERKEZETŰ PP/FA/ELASZTOMER HIBRID KOMPOZITOK

**Link Zoltán<sup>1,2)</sup>, Renner Károly<sup>1,2)</sup>, Móczó János<sup>1,2)</sup>, Hermann Braun<sup>3)</sup>, Christoph Burgstaller<sup>4)</sup>, Petar Doshev<sup>3)</sup>, Markus Gahleitner<sup>3)</sup>, Pukánszky Béla<sup>1,2)</sup>**

<sup>1</sup> *Műanyag és Gumiipari Laboratórium, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Műegyetem rkp. 3., 1111 Budapest, Magyarország*

<sup>2</sup> *Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Természettudományi Kutatóközpont, Magyar Tudományos Akadémia, Pusztaszeri út 59-67., 1025 Budapest, Magyarország*

<sup>3</sup> *Borealis Polyolefine GmbH, St.-Peter-Strasse 25, 4021 Linz, Ausztria*

<sup>4</sup> *Transfercenter for Plastics Technology, Upper Austrian Research GmbH, Franz-Fritsch Strasse 11, A-4600 Wels, Ausztria  
zlink@mail.bme.hu*

Természetes töltőanyagot tartalmazó polimer kompozitokat széles körben alkalmaznak napjainkban. A nagymértékű előretörés oka a természetes töltőanyagok kedvező ára, hozzáférhetősége, jó mechanikai tulajdonságai és az, hogy ezek megújuló nyersanyagok. Legjellemzőbb felhasználási területeik az építőipari burkolati elemek, autóipari alkatrészek és műanyag profilok. Sok esetben a töltőanyagot tartalmazó kompozitoknak a nagy merevségen kívül nagy ütésállósággal kell rendelkezniük, amit elasztomer hozzáadásával érhetünk el. A töltőanyagot tartalmazó heterogén rendszerek tulajdonságait a komponensek jellemzői, az összetétel, a határfelületek kölcsönhatása és a szerkezet határozza meg. Munkánk célja háromkomponensű rendszerek szerkezetének szabályozása, valamint a szerkezetnek a kompozit tulajdonságaira gyakorolt hatásának a vizsgálata. Az elasztomert és töltőanyagot is tartalmazó kompozitoknál kétféle szerkezet alakulhat ki: független diszperzió (a töltőanyag és az elasztomer függetlenül oszlik el a mátrixban) és beágyazott szerkezet (amikor az elasztomer bevonja a töltőanyag szemcséket).

Munkánk során különböző funkcionális polimerek és eltérő szemcseméretű falisztek alkalmazásával készítettünk kompozitokat. Az elkészített kompozitok mechanikai tulajdonságait szakítóvizsgálatokkal jellemeztük. A kialakult szerkezetet pásztázó elektronmikroszkópos felvételekkel vizsgáltuk. A beágyazott szemcse mennyiségét a Lewis-Nielsen modell segítségével számítottuk.

A mechanikai tulajdonságok vizsgálata és a SEM képek analízise alapján megállapítottuk, hogy a különböző funkcionális polimerrel és faliszttel készült kompozitok szerkezete eltérő. A kialakult szerkezet függ a feldolgozás körülményeitől, a mátrix viszkozitásától, az alkalmazott funkcionális polimertől és a töltőanyag szemcseszerkezeti jellemzőitől. Kapcsolóanyag (maleinsavanhidriddel ojtott polipropilén - MAPP) alkalmazásával sikerült létrehozunk diszpergált, míg funkcionális elasztomerrel (maleinsavanhidriddel ojtott etilén-propilén-dién elasztomer - MAEPDM) beágyazott szerkezetet. A feldolgozás során kialakult szerkezet és a tulajdonságok között szoros összefüggést állapítottunk meg.



# STABILIZÁLT FOSZFONÁTOK HWE-REAKCIÓI: A STILL-GENNARI PROTOKOLL KITERJESZTHETŐSÉGÉNEK VIZSGÁLATA

**K. Molnár<sup>1</sup>, J. Behra<sup>2</sup>, L. Takács<sup>1</sup>, Zs. Kardos<sup>1</sup>, F. Faigl<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Sanofi /Chinoin - PG üzletág, 1045. Budapest, Tó utca 1-5.

<sup>2</sup>National Graduate School of Chemistry and Chemical Engineering of Montpellier,  
8 Rue de l'Ecole Normale - 34296 Montpellier, France

<sup>3</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,  
1111. Budapest, Budafoki út 8.  
katalin.molnar2@sanofi.com

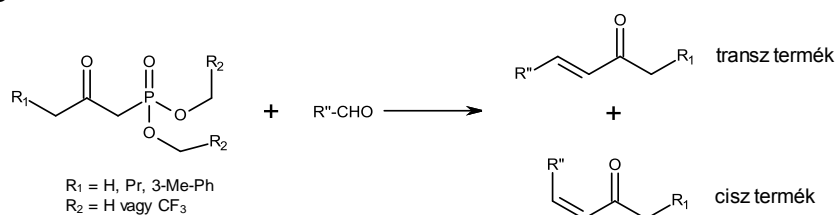
A **dimetil- $\beta$ -oxo-alkil-foszfónátok** Horner-Wadsworth-Emmons (HWE) reakcióban széleskörben használt reagensek transz kettős kötésű vegyületek szelektív előállítására, ugyanakkor cisz kettős kötésű vegyületek előállítására nem alkalmasak. Still és Gennari azonban kidolgozott egy módszert [1], amelynek alkalmazásával **bisz-trifluoretil- $\beta$ -oxo-alkil-foszfónátok** felhasználásával néhány esetben jó szelektivitással cisz kettős kötést alakítottak ki, vagyis a foszfónátok észterfunkciójának és a reakciókörülményeknek a módosításával a kialakult kettős kötés geometriája megváltozott.

Jin és társai [2] továbbfejlesztették Still és Gennari módszerét, és bisz(2,2,2-trifluoretil)(2-oxopropil)- és -(1-metil-2-oxopropil)foszfónátokat aromás és alifás aldehidekkel reagáltatva igen jó szelektivitással állítottak elő cisz- $\alpha,\beta$ -telítetlen-ke-tonokat.

Munkánk során célul tűztük ki a módszer kiterjeszthetőségének vizsgálatát azonos alkil-oldalláncú dimetil-, 2,2,2-trifluoretil-metil- és bisz(2,2,2-trifluoretil)- $\beta$ -oxo-alkil-foszfónátokra, melyek szerkezeti analógjai a prosztoglandin kémiában használatos foszfónátoknak. Vizsgáltuk a mono- és bisz-trifluoretil-foszfonsavészterek előállítását, a hangsúlyt a könnyen hozzáférhető dimetil-észterekből kiinduló előállításra helyezve, hogy a módszer minél könnyebben integrálható legyen a meglévő prosztoglandin szintézisekbe.

Reakciópartnerként reprezentatív aldehideket választottunk, melyeket a Still és Gennari által leírt, valamint a stabilizált foszfónátoknál használt általános protokoll szerint reagáltattunk az előállított foszfónátokkal a cisz és transz enonok előállítására (**1. ábra**).

A termékelegyekben a cisz/transz szelektivitást és a konverziót GC-MS mérésekkel határoztuk meg.



**1. ábra. A vizsgált Horner-Wadsworth-Emmons reakciók általános sémája**

Eredményeink szerint a legjobb transz szelektivitás dimetil-foszfónát észterekkel, legjobb cisz szelektivitás pedig bisz-2,2,2-trifluoretil-foszfónát észterekkel érhető el. A 2,2,2-trifluoretil-metil-foszfónát észterek esetében a cisz/transz izomerarány nagymértékben függ az alkalmazott reakciókörülményektől.

A 2,2,2-trifluoretil-metil-foszfónát észterek nem ismertek az irodalomban. Előállításukra általános módszert dolgoztunk ki.

## References:

[1] W.C. Still, C. Gennari, Tetrahedron Letters, 24, 4405-4408 (1983).

[2] W. Yu, M. Su, Zh. Jin, Tetrahedron Letters, 40, 6725-6728 (1999).

# NITROGÉN TARTALMÚ SZÉN AEROGÉLEK

B. Nagy<sup>1</sup>, K. Gazda<sup>1</sup>, G. Dobos<sup>2</sup>, O. Czakkel<sup>3</sup>, E. Geissler<sup>4</sup>, K. László<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
1111 Budafoki út 8, Budapest, Magyarország

<sup>2</sup>Atomfizika Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budafoki út 8,  
Budapest, Magyarország

<sup>4</sup>Institut Laue-Langevin, BP 156, 6. rue Jules Horowitz, 38042 Grenoble, France

<sup>5</sup>Laboratoire Interdisciplinaire de Physique CNRS UMR 5588, Université J. Fourier de Grenoble,  
St Martin d'Hères, France.

email: balazs.nagy@mail.bme.hu

A széngelek napjaink legdinamikusabban fejlődő anyagai közé tartoznak. Sok előnyös tulajdonságuknak (pl.: rendkívül kis sűrűség, hőszigetelő és elektromosan vezető tulajdonságok összekapcsolódása) köszönhetően igen széles felhasználási lehetőséget kínálnak.

Az előállításuk során alkalmazott szol-gél technológia lehetővé teszi tiszta, szabályozott szerkezetű, alkalmazásorientált anyagok létrehozását. Morfológiájuk és felületkémiajuk megfelelő beállítása mellett alkalmazhatóak hő és hangszigetelőként;

szuperkondenzátorokban; napelemekben, kromatográfiás töltettként, adszorbensekként vagy akár katalizátor, illetve katalizátor hordozóként.

A mezopórusos szén aerogélek leggyakoribb prekursorai a rezorcin (R) és formaldehid (F) polikondenzációjával nyert ún. RF hidrogélek. A hidrogélek oldószercserét követő szuperkritikus extrakcióval nyerjük a polimer-, majd ezek szenesítésével a szén aerogéleket. A szol-gél reakció során kialakuló szerkezetet több paraméterrel is befolyásolhatjuk, úgy mint a pH, a sztöchiometriai arányok, az oldószer minősége, a szárítás körülményei [1]. A rezorcin mellett vagy helyett nitrogén tartalmú monomereket (pl.: melamin, karbamid, lizin) is alkalmazhatunk, ezzel nitrogén tartalmú szén aerogélekhez juthatunk. Nitrogén tartalmú szenek katalizálják az oxigén redukciós reakciót (ORR) így alkalmasak lehetnek a protoncsere-membrános üzemanyag cellákban (PEMFC) katalizátornak csökkentve (vagy teljesen kiváltva) ezzel az üzemanyagcellákban alkalmazott platina mennyiségét.

Munkánk során rezorcin-melamin-formaldehid (RMF) hidrogélekből kiindulva állítottunk elő nitrogén tartalmú szén aerogéleket. A hidrogélek előállítása során Pekala és Gorgulho receptjeit vettük alapul [1, 2]. A R/F és a R/C molarányok 50 illetve 0,5 értéken lettek tartva, miközben a R/M molarányt 1 és 10 között változtattuk. A képződött hidrogélek pórusaiban lévő vizet acetonnal cseréltük, majd a géleket szuperkritikus szén-dioxidos szárítást követően nitrogén atmoszférában 900 °C-on szenesítettük.

Mintáinkat különböző fizikai-kémiai módszerekkel jellemeztük: a hidrogélek mechanikai tulajdonságait modulus méréssel, az aerogélek morfológiáját pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM), gázadszorpcióval illetve kis és nagyszögű röntgenszórással (SAXS, WAXS). A termikus viselkedést termogravimetriával, a felületkémiaát röntgengerjesztéses fotoelektron spektroszkópiával (XPS) vizsgáltuk.

## Köszönetnyilvánítás

A munka (vagy kutatás) a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. A munka a 2009-269267 számú FP7 projekt támogatásával valósult meg. Ezúton köszönjük a mérési lehetőséget az ESRF BM2 mérőhelyének a röntgenszórásos mérések lehetőségének biztosítását.

## Irodalmak

[1] RW. Pekala Journal of Materials Science, 24, 3221 (1989)

[2] H. F. Gorgulho, F. Gonçalves, MFR. Pereira, J. Figueiredo, Carbon 47, 2032 (2009).

[3] O. Czakkel, K. Marthi, E. Geissler, K. László K., Microporous and Mesoporous Materials, 86, 124 (2005)

# POLIASZPARAGINSAV RESZPONZÍV TULAJDONSÁGAINAK MÓDOSÍTÁSA

**Németh Csaba, Gyarmati Benjámín, Szilágyi András**

*Lágy Anyagok Kutatócsoport, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, H-1111 Budapest, Budafoki út 8.  
E-mail: nemeth.csaba@mail.bme.hu*

Napjaink gyógyszerkutatásában egyre nagyobb hangsúlyt fektetnek a hatóanyagok minél pontosabb hely és idő szerinti célba juttatását elősegítő, ún. „szabályozott és célzott hatóanyag-leadású” rendszerek fejlesztésére [1]. A modern hatóanyag-leadó rendszerek fő előnye a mellékhatások csökkentésében és az effektív hatóanyagszint hosszú idejű fenntartásában rejlik.

Ezen törekvések legfontosabb képviselői az akrilát alapú kopolimerekre épülő pH érzékeny gyógyszer-filmbevonatok. A kopolimerek fizikai-kémiai sajátosságai az összetétellel széles határok között változtathatók [2], melynek következtében a programozott gyógyszerhatóanyag-leadás többféle formája – mint pl. a célzott és a szabályozott hatóanyag-leadás – is megvalósítható e filmekkel. Az akrilát alapú rendszerek komoly hátránya azonban, hogy biológiailag nem lebonthatók.

A problémára megoldást jelenthet a pH-érzékeny poliaszparaginsav (PASP) alkalmazása. A PASP orvosbiológiai szempontból az egyik legígéretesebb polimer [3], hiszen e poliaminosav bizonyítottan biokompatibilis és biológiailag lebontható, valamint polielektrolit jellegének köszönhetően oldhatósága erősen függ az oldat pH-jától és az ionerősségétől.

Kutatómunkám célja olyan módosított PASP polimerek előállítása volt, melyek rezponzív tulajdonságai – pH- és hőmérsékletfüggés – az összetétellel szabályozhatóak, és a későbbiekben gyógyszer-filmbevonatok alapjául szolgálhatnak, alternatívát kínálva az akrilát alapú polimerekre.

Munkám során különböző monoaminokkal és diaminokkal módosított poliszukcinimid (PSI) polimereket állítottam elő, melyeket a megfelelő poliaszparaginsav származékokká hidrolizáltam. Oldhatósági kísérletekkel vizsgáltam a módosított polimerek fizikai-kémia tulajdonságait, és az adott módosító molekuláknak a polimer rezponzív tulajdonságaira gyakorolt hatását. Az eredmények tükrében megállapítható, hogy olyan módosított PASP polimereket állítottam elő, melyek pH- és hőmérsékletfüggő oldhatósága a megfelelő kémiai módosítással általunk szabályozható.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatást támogatta az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA PD76401) és az új Széchenyi Terv (TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0009). A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült.

## **Referenciák:**

- [1] D. Schmaljohann, *Advanced Drug Delivery Reviews*, 58, 1655 (2006)
- [2] K. G. Wagner, J. W. McGinity, *Journal of Controlled Release*, 82, 385 (2002)
- [3] B. Gyarmati, B. Vajna, Á. Némethy, K. László, A. Szilágyi, *Macromolecular Bioscience*, 13, 633 (2013)

# SZILÁRD FÁZISÚ FERMENTÁCIÓJÁVAL ELŐÁLLÍTOTT HIDROLITIKUS ÉS LIGNINOLITIKUS ENZIMEK EXTRAKCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA KIS FREKVENCIÁS ULTRAHANG ALKALMAZÁSÁVAL

**Szabó O.E.,<sup>1</sup> Csiszár E.,<sup>1</sup> Kiss K.,<sup>1</sup> Tóth K.,<sup>2</sup> és Szakács G.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
1521 Budapest, Pf. 91, Magyarország*

<sup>2</sup>*Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi  
Egyetem, 1521 Budapest, Pf. 91, Magyarország  
email: oszabo@mail.bme.hu*

A szilárd fázisú fermentáció (SSF) ígéretes alternatívája az ipari enzimtermelésre széles körben elterjedt szubmerz fermentációs eljárásnak [1]. Az SSF módszerrel szubsztrát specifikus enzimkeverékeket állíthatunk elő, amelyek például a biofehérítés során eredményesen alkalmazhatók [2]. Az SSF módszer gazdaságosabb, ha a nyers fermentált termékeket közvetlenül - downstream műveletek nélkül - használjuk enzimforrásként. Számos alkalmazás előtt viszont szükséges a szilárd szubsztrátumból az enzimek kinyerése extrakcióval [3]. Az élelmiszeriparban már használnak ultrahangot a bioaktív komponensek extrakciójának a segítésére. Az SSF mintákból a nyers enzimkeverékek kinyerésére viszont eddig még nem alkalmazták az ultrahangot.

Munkám célja a szilárdfázisú fermentációval előállított fermentumokból a nyers enzimkeverékek extrakciójának fokozása kisfrekvenciás ultrahang alkalmazásával fokozzam, és az ultrahang enzimaktivásra gyakorolt hatásának a jellemezése.

Ligninolitikus és hidrolitikus enzimeket termeltettünk lenrost szubsztráton hat fonalas gomba törzssel SSF módszerrel. Az egyik legjobb enzimtermelő törzset (*Aspergillus oryzae* NRRL 3485) tovább vizsgáltam kisfrekvenciás ultrahanggal különböző amplitúdók mellett. Eredményeim bizonyítják, hogy az ultrahang (40 kHz, 60 perc) kezelés nagymértékben segíti a nyers enzimek extrakcióját és jelentős szűrőpapír lebontó, lignin-peroxidáz, poligalakturonáz és lakkáz aktivitás növekedést eredményez a kontroll rázott rendszerhez viszonyítva. Kisfrekvenciás ultrahang az alkalmazott körülmények között nem befolyásolja számottevően az enzimoldat előbb említett aktivitás értékeit.

## **Köszönetnyilvánítás:**

A szerzők köszönetet mondanak az OTKA-nak a kutatás támogatásáért (Projekt azonosító: K82044).

## **Felhasznált irodalom:**

- [1] A. Pandey, P. Sevakumar, C.R. Soccol, and P. Nigam, Curr. Sci., 77, 149 (1999)
- [2] L. Christopher, S. Bissoon, S. Singh, J. Szendefy, and G. Szakacs, Process Biochem., 40, 3230 (2005)
- [3] S.A. Singh, M. Ramakrishna, and A.G. Appu Rao, Proc. Biochem., 35, 411 (1999)

# MULTIRESZPONZÍV POLI(ASZPARAGINSAV)-L- POLI(N-IZOPROPILAKRILAMID) KOTÉRHÁLÓS HIDROGÉLEK

**Katalin Solti<sup>1</sup>, Árpád Némethy<sup>1</sup>, Benjámín Gyarmati<sup>1</sup>, Erzsébet Csányi<sup>2</sup> and  
András Szilágyi<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Budapest Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen, Fizikai Kémia és Anyagtudományi  
Tanszék*

*H-1111 Budapest, Budafoki út 8.*

*Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszertechnológiai Intézet, H-6720 Szeged, Eötvös u. 6.*

*email: [solti.katalin@mail.bme.hu](mailto:solti.katalin@mail.bme.hu)*

A polimer gélek szerepe felértékelődött a gyógyszertechnológiában, mivel a belőlük készült hordozó mátrixokkal biztosítani lehet a hatóanyag-molekulák jól definiált kinetikával lejátszódó kioldódását. Az emberi testben a két legmeghatározóbb fizikai-kémiai paraméter a hőmérséklet és a pH, ezért kerültek a fejlesztések homlokterébe az olyan multireszponzív polimer gélek, melyek tulajdonságaik ugrásszerű és jelentős megváltoztatásával válaszolnak az említett környezeti paraméterek változására.

A kutatómunka célja egy olyan kotérhálós hidrogél előállítása volt, melyben a hőmérsékletérzékeny poli(*N*-izopropilakrilamid) [PNIPAAm], illetve a pH-érzékeny poliaszparaginsav [PASP] tulajdonságai ötvöződnék.

A kotérháló szintézise vizes közegben zajlott. A pH-érzékeny poliszukcinimid [PSI] alap polimer vízdoldhatóságát a főlánc etanol-aminnal történő kémiai módosításával lehetett megoldani. Allilamin oldalcsoportok beépítésével biztosítottam, hogy a PSI részt vegyen a *N*-izopropilakrilamid [NIPAAm] gyökös mechanizmusú polimerizációjában, kialakítva ezzel a PSI-*l*-PNIPAAm kotérhálós rendszert. Lúgos hidrolízis után kaptam meg a PASP-*l*-PNIPAAm kotérhálós hidrogélt.

A hidrogélek szerkezetét NMR- és FTIR mérésekkel vizsgáltam. A SEM felvételekkel igazoltam, hogy a gélek pórusmérete és morfológiája megváltozik a környezeti paraméterek hatására. Egyensúlyi duzzadásfok mérésekkel vizsgáltam a gélek pH-, valamint hőmérsékletérzékenységét. Előzetes kioldódás vizsgálatokat végeztem egy széles körben alkalmazott nem-szteroid típusú gyulladáscsökkentővel, diklofenák-nátriummal, mint modell hatóanyag molekulával.

Az *in vitro* kioldódás vizsgálatok eredményei alapján elmondható, hogy a kotérhálós hidrogélek szabályozott gyógyszerhatóanyag-leadás céljára alkalmasak lehetnek.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatást támogatta az OTKA Alapítvány (PD76401) és NKTH - ASTAR Hungarian - Singaporean Bilateral S&T International Co-operation (BIOSPONA), valamint a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj.

## **References:**

[1] Á. Némethy, K. Solti, L. Kiss, B. Gyarmati, M. Á. Deli, E. Csányi, A. Szilágyi: pH and temperature-responsive poly(aspartic acid)-*l*-poly(*N*-isopropylacrylamide) conetwork hydrogel, *European Polymer Journal* 49, 2392-2403 (2013)

# HUMÁN ÉS PATKÁNY SLC22A5/Slc22a5 (OCTN2/Octn2) SZERVES KATION/KARNITIN TRANZSPORTER – FAJSPECIFITÁSI VIZSGÁLATOK

**Szabó Kitti<sup>1</sup>, Nagy Zoltán<sup>1</sup>, Juhász Viktória<sup>1</sup>, Joseph Zolnerciks<sup>1</sup>, Csorba Attila<sup>1</sup>, William Johnson<sup>1</sup>, Tímár Zoltán<sup>1</sup>, Molnár Éva<sup>1</sup>, Krajcsi Péter<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> SOLVO Biotechnology, Szeged Közép fasor 52.Hungary  
kszabo@solvo.com

Az L-karnitin (3-hidroxi-4-N-(trimetilamino)-butirát) részt vesz a  $\beta$ -oxidációban, így számos fiziológiai funkciót lát el. Az OCTN2 („novel organic cation/carnitine transporter 2”; SLC22A5) és a patkány ortológ Octn2 (rSlc22a5) membrán transzporter fehérjék a szervezetben mindenhol megtalálhatóak, és nagy valószínűséggel az L-karnitin és rokonvegyületeinek nátrium-függő specifikus transzportjáért felelősek. Bár az Octn2/OCTN2 általános gyógyszer transzporterként nem működik, a gyógyszerek farmakokinetikájában játszott szerepe bizonyított, különös tekintettel a vesében történő kiválasztás során.

A mildronát (3-(2,2,2-trimetilhidrazinium)propionát) egy karnitin analóg, hatással van a zsírsav oxidációra, a karnitin bioszintézis enzimeit képes gátolni. Kutatások kimutatták, hogy a patkány Octn2 képes szállítani a mildronátot, viszont a folyamat karakterisztikáját még nem írták le.

**Célok:** A patkány Octn2 és a humán OCTN2 transzporterek sajátosságainak vizsgálata és összehasonlítása, különös tekintettel a mildronát Octn2/OCTN2 általi transzportjára. Az L-karnitin felvételt gátló gyógyszermolekulák azonosítása és vizsgálata, a patkány és humán ortológok fajspecifitási vizsgálatának elvégzése.

**Anyagok és módszerek:** Patkány és humán Octn2/OCTN2 transzporter fehérjét túltermelő CHO-K1 emlős sejtvonalakkal dolgoztunk a két transzporter fajspecifitási vizsgálatának elvégzése során. A sejtes alapú “uptake” (anyagfelvétel) esszében patkány és humán Octn2/OCTN2 transzportereket túltermelő CHO-K1 sejtvonalakat használtunk. Az L-karnitin felvétel detektálásához radioaktív jelölést használtunk, a mildronát esetében pedig HPLC-MS módszert alkalmaztunk. Az L-karnitin felvétel gátlása során többek között amiloridot, imatinibet, mildronátot, omeprazolt, kinint, kinidint és vikrisztint teszteltünk.

**Összefoglalás:** A humán OCTN2-höz hasonlóan a patkány ortológ is szállítja a mildronátot. Az L-karnitin alacsonyabb affinitású szubsztrátja a patkány Octn2-nek mint a humán OCTN2-nek. Számos farmakológiailag fontos gyógyszermolekula hatással van az L-karnitin Octn2/OCTN2 általi transzportjára, és számos esetben a patkány és humán ortológok között eltérés tapasztalható. A patkány Octn2-nél (a humán OCTN2-vel összehasonlítva) szignifikánsan magasabb IC<sub>50</sub> értékeket tapasztaltunk az imatinib, mildronát, omeprazol, kinin és kinidin esetében, míg a nelfinavir és a vinkrisztin esetében alacsonyabb IC<sub>50</sub> értékeket kaptunk.

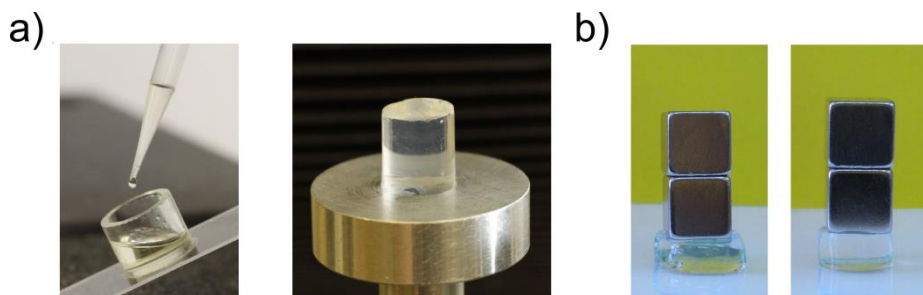
# REDOXÉRZÉKENY POLIAMINOSAV HIDROGÉLEK

**Szilágyi Barnabás Áron<sup>1</sup>, Gyarmati Benjámín<sup>1</sup>, Szilágyi András<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Lágy Anyagok Kutatócsoport, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék,  
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,  
1111 Budapest, Budafoki út 8.  
E-mail: softmatter@mail.bme.hu

Az elmúlt évtizedben komoly kutatói érdeklődés összpontosult a rezponzív hidrogélek fejlesztésére, melyek specifikus választ képesek adni olyan környezeti paraméterek megváltozására, mint a hőmérséklet, a pH, illetve a redoxpotenciál. A biológiai rendszerek redoxfolyamatainak fő szabályozója a glutation, mely oxidáció, illetve redukció hatására reverzibilis tiol-diszulfid átalakulást szenved. A glutation koncentrációja jelentősen különbözik az intra- illetve extracelluláris térben, mely számos, redukcióra érzékeny hatóanyag-leadó illetve génterápiás rendszer alapjául szolgál [1].

Reszponzív hidrogélek tervezése során a szervezetben jelenlévő redoxpotenciál gradiens két különböző módon aknázható ki: redox indukált szol-gél átalakulást mutató térháló szintézisében vagy olyan gélek előállításán, melyek duzzadási, elasztikus és transzport tulajdonságai nagymértékben változnak a különböző redoxpotenciálú környezetekben [2]. Redoxérzékeny poliaszparaginsavat (PASP) tiolcsoportot tartalmazó oldalláncok felvitelével állítottunk elő. A ciszteaminnal módosított PASP reverzibilis szol-gél-szol átmenetet mutatott oxidáció, majd újbóli redukció hatására [3]. Bizonyítottuk, hogy a redoxérzékenységet a gélben végbemenő tiol-diszulfid átalakulás eredményezi. A tiolált polimer alacsony viszkozitása miatt injektálható anyagként használható fel, mely oxidáció hatására kémiai gélle alakítható (1. ábra, a). A PASP gél - melyet a redoxérzékeny polimer permanens térhálósításával állítottunk elő - duzzadási és mechanikai tulajdonságai reverzibilis változást mutattak redukáló, illetve oxidáló környezetben, továbbá megállapítottuk, hogy az oxidáció kihasználható a hidrogél mechanikai stabilitásának megnövelésére (1. ábra, b).



1. ábra a) Ciszteaminnal módosított PASP szol-gél átmenete oxidáció hatására  
b) Redoxérzékeny PASP gél oxidáció által megnövelt mechanikai stabilitása

A redoxérzékeny PASP gél duzzadásfoka erősen pH-függő, így kettős érzékenysége miatt széleskörben alkalmazható lehet különféle orvosbiológiai területeken, például injektálható implantátumként vagy célzott hatóanyag-leadó rendszerként.

Köszönetnyilvánítás: A kutatást támogatta az OTKA (PD76401) és az NKTH A\*STAR Hungarian Singaporean Bilateral S&T International Co-operation (BIOSPONA). A kutatást támogatta továbbá a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj.

[1] H. Meng, W.E. Hennink, Z. Zhong, *Biomaterials*, 30, 2180. (2009)

[2] B. Gyarmati, Á. Némethy, A. Szilágyi, *European Polymer Journal*, 49,1268. (2013)

[3] B. Gyarmati, B. Vajna, Á. Némethy, K. László, A. Szilágyi, *Macromolecular Bioscience*, 13, 633. (2013)

# VÖRÖSISZAP TALAJRA GYAKOROLT HATÁSÁNAK VIZSGÁLATA INTEGRÁLT METODIKA ALAPJÁN

V. Feigl<sup>1</sup>, K. Gruiz<sup>1</sup>, O. Klebercz<sup>1</sup>, É. Ujaczki<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi  
Tanszék, Szent Gellért tér 4., Budapest, Magyarország

ujaczki.eva@gmail.com

2010. október 4-én bekövetkezett Magyarország legsúlyosabb környezeti katasztrófája. Átszakadt az ajkai vörösiszap-tározó 10. számú kazettájának gátja. Az ott tárolt kb. 800 ezer m<sup>3</sup> mennyiségű, erősen lúgos anyag előntötte a térség három faluját. Kutatócsoportunk az MTA ATK TAKI (Magyar Tudományos Akadémia Agrártudományi Kutatóközpont Talajtani és Agrokémiai Intézet) munkatársaival közösen vizsgálta az érintett mezőgazdasági területek talajait. Kutatómunkák célja volt a vörösiszappal szennyezett talajok rövid- és hosszútávú környezeti kockázatának felmérése. Továbbá hogy meghatározzuk a károsan még nem ható vörösiszap-talaj arányt, vörösiszappal és talaj keveréket tartalmazó mikrokozmoszokban.

Annak érdekében, hogy meghatározzuk a maximális vörösiszap koncentrációt, amely talajba keverhető két kísérletsorozatot indítottunk. Az első kísérletsorozatban a vörösiszap rövidtávú hatását vizsgáltuk 0–100%-ban a talajba keverve, míg a második sorozatban a hosszú távú hatásokat követtük figyelemmel, 0–40%-ban a talajtömeghez képest. A kísérleteket integrált monitoring módszeregyütessel követtük nyomon, amely magában foglalja a fizikai, a kémiai, a biológiai és az ökotoxikológiai módszereket is. A káros hatás felméréséhez használt környezetoxikológiai tesztorganizmusok három trofikus szintről származtak: *Aliivibrio fischeri* (bakteriális), *Sinapis alba* (növényi), *Folsomia candida* (állati). A biológiai és környezetoxikológiai tesztelés célja volt, hogy meghatározzuk azt a vörösiszap mennyiséget, amelyet a talajba lehet keverni, toxikus hatás nélkül.

Az eredmények alapján elmondható, hogy 10% az a vörösiszap mennyiség, amely hosszútávon a talajhoz keverhető káros hatás nélkül. A kémiai vizsgálatok azt mutatták, hogy a Na<sup>+</sup> és összes só tartalma nőtt a vörösiszap talajhoz keverésével, azonban 5%-nak megfelelő vörösiszap-tartalom mellett ez még elfogadható szinten maradt. 5% feletti vörösiszap-talaj arány esetén eltolódott a pH erősen lúgos tartományba.

**Köszönetnyilvánítás:** A munkát a Nemzeti Kutatási és Technológiai Hivatal (SOILUTIL TECH\_09-A4-2009-0129) támogatta.