



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Nemzeti Felsőoktatási ösztöndíj

Előadás adatlap

2022/2023. tanév

Adatok:

Név:	Szabó Renáta
Neptun-kód:	P5GHYJ
Képzés neve:	Gyógyszervegyész-mérnöki mesterképzési szak, nappali MSc
Képzés kódja:	4N-M3
Beszámolási időszak:	2021. július 1. – 2022. június 30.
Melléklet sorszáma:	4. számú melléklet
Téma kódja:	C

Előadásra vonatkozó adatok: A megfelelő bekarikázandó:

☒ HAZAI	☐ NEMZETKÖZI
---	-------------------------------------

Előadás pontos címe:	Elemi kén alapú multikomponensű reakciók fejlesztése izotiocianát intermediereken keresztül
Előadás nyelve:	magyar
Előadás dátuma ¹ :	2022.05.25.
Előadás helye ² :	Balatonszemes, Magyarország
Előadás elérhetősége (amennyiben van):	–
Rendezvény megnevezése:	Heterociklusos és Elemorganikus Kémiai Munkabizottság ülése
Témavezető neve, oktatási szervezeti egysége:	Dr. Ábrányi-Balogh Péter, Németh András György Természettudományi Kutatóközpont

	Szerző(k)	Szerző(k) munkájának %-os megoszlása ³	Szerző(k) aláírása
1.	Szabó Renáta	45	<i>Szabó Renáta</i>
2.	Németh András György	55	<i>Németh András György</i>
3.	Dr. Ábrányi-Balogh Péter	0	<i>Dr. Ábrányi-Balogh Péter</i>

Budapest, 2022. május 20.

BME SZERVES KÉMIA ÉS TECHNOLOGIA TSZ
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.
Adószám: 15306799-4-43Dr. Ábrányi-Balogh Péter
Csoportos közösségi adószám: 17783305-5-43
Adószám: HU17783305
témavezető

Németh András György

témavezető

Szabó Renáta

pályázó

¹ éééé.hh.nn. – éééé.hh.nn. formátum² helység, ország³ Témavezető igazolja, aláírásával hitelesíti.

Heterociklusos és Elemorganikus Kémiai Munkabizottság ülése
Balatonszemes, 2022. május 23-25.

Május 23. Hétfő

11:30-13:30 ebéd

13:30-15:20 Elnök: Novák Zoltán

Ötvös Sándor: Királis gyógyszerhatóanyagok és intermedierek enantioszelektív szintézise többlépéses áramlásos kémiai módszerekkel

Zsigulics Bálint, Angyal Péter, Mészáros Bence, Varga Szilárd, Soós Tibor: A Hunterine A bioinspirált szintézise

Faragó Tünde, Palkó Márta, Szatmári István: Változatosan szubsztituált enantiomertiszta aliciklusos béta aminosav-származékok szintézise és organokatalitikus alkalmazhatóságának vizsgálata izatin aszimmetrikus aldol reakciójával

Homolya Ágnes, Tóth Éva, Malecz Ádám Szilárd, Petróczi Ferenc Dániel, Csomay Eszter, Tóth Marietta, Somsák László, Juhász László: 2-Jód 1-C szubsztituált glikálok Sonogashira és Heck és Suzuki-Miyaura kapcsolási reakciói

Czuczai Tamás, Murányi József, Bárány Péter, Móra István, Borbély Adina, Csala Miklós, Csámpai Antal: Új imipridon-ferrocén hibridek szintézise és antiproliferatív hatásuk vizsgálata

15:20-15:50 szünet

15:50-17:10 Elnök: Kurtán Tibor

Makra Zsófia: Trialkil foszfin indukálta dominó reakciók: 5,6-dihidropiridin-2(1H)-on és piridin-2(1H)-on származékok szintézise

Lasányi Dániel, Máth Dániel, Tolnai Gergely: Kis gyűrűtagszámú feszült gyűrűs karbociklusok szintézise és gyűrűnyitási reakciói

Kupai József, Dargó Gyula, Erdélyi Dóra, Molnár Balázs, Bagi Péter, Huszthy Péter, Kisszékelyi Péter: Cinkona organokatalizátor alkalmazása és visszaforgatása lipofil oldallánc beépítésének segítségével

Albitz Krisztián, Csókás Dániel, Dobi Zoltán, Pápai Imre, Soós Tibor: Prenilezett természetes vegyületek "late-stage" átalakítása metatézissel

17:10-17:40 szünet

17:40-19:00 Elnök: Timári Géza

Kalapos Péter, London Gábor: Ditienilbenzol alapú multifotokróm rendszerek molekuláris napenergia tárolásra

Lőrinczi Bálint, Simon Péter, Szatmári István: Triaril-metán biokonjugátumok szintézise indol és kinurénsav elemekből

Mándi Attila, Kovács Tibor, Király Sándor Balázs, Kurtán Tibor: Természetes és szintetikus származékok sztereokémiai vizsgálata kiroptikai és NMR módszerekkel

Sipos Gellért: DNS-kódolt vegyületkönyvtárak szintézise

19:00-20:00 vacsora

Május 24. Kedd

7:00-8:50 reggeli

8:50-10:10 Elnök: Kupai József

Angyal Péter, Hegedüs Kristóf, Mészáros Bence, Daru János, Varga Szilárd, Soós Tibor: Kratom alkaloidok bioinspirált szintézise

Hegedüs Dóra, Szatmári István, Spengler Gabriella, Szemerédi Nikoletta: Bioaktív naftoxazin-származékok szintézise glioxilát-szubsztrát alkalmazásával

Sőregi Petra, Zwillinger Márton, Csékei Márton, Kotschy András: Információtárolás deuterált kinolinszármazékokkal

Kollár Levente, Martina Gobec, Ábrányi-Balogh Péter, Ferenczy György, Stanislav Gobec, Izidor Sosič, Keserű György Miklós: Fragmensméretű kovalens immunoproteaszóma-inhibitorok fejlesztése

10:10-10:40 szünet

10:40-12:00 Elnök: Soós Tibor

Kiss Johanna, Fehér Zsuzsanna, Kárpáti Levente, Kisszékelyi Péter, Huszthy Péter, Kupai József: Poli(etilén-tereftalát) fenntartható lebontása szilikagélhez rögzített organokatalizátorok segítségével

Kajtár Mihály, Király Sándor Balázs, Kurtán Tibor: Királis, kondenzált heterociklusok előállítása domino gyűrűzárási szekvenciákkal

Pethő Bálint, Szilágyi Gábor, Mengyel Béla, Nagy Tamás, Kátainé Fadgyas Katalin, Volk Balázs: "Ami befolyik, az rögtön kifolyik" – egy kulcs intermedier áramlásos kémiai fejlesztése

Gazdag Tamás, Kalapos Péter, Mayer Péter, London Gábor: Tiofén tartalmú antiaromás rendszerek: szintetikus hangolás és fotokémiai kontrol

12:00-13:30 ebéd

13:30-15:30 szünet

15:30-17:10 Elnök: Volk Balázs

Decsi Balázs, Mohácsi Zsombor, Oláh Julianna, Balogh-Weiser Diána, Balogh György Tibor: Klorokvin és hidroxiklorokvin oxidatív metabolizmusának biomimetikus modellezése

Hegedüs Kristóf, Szobota András, Soós Tibor: Királis oxetánok szintézise

Cseri Levente, Kovács Ervin, Jancsó Attila, Galbács Gábor, Rózsa Balázs, Mucsi Zoltán: Benzilidénimidazol-alapú kismolekulás fluorofórok szintézise és fluoreszcenciás mechanizmusa

Khdar Alabdeen Zein, Le Minh Tam, Schell Zsuzsa, Zupkó István, Szakonyi Zsolt: Synthesis and atiproliferative activity of Gibberellic acid-derived aminodiols

Jablonkai István, Gazdag Tamás, Mayer Péter, Kalapos Péter, London Gábor: Egy fotokapcsolható palládiumkomplex aktivitásának vizsgálata Suzuki reakciókban

17:10-17:40 szünet

17:40-19:00 Elnök: Kotschy András

Dudás Ádám, Gyömöre Ádám, Mészáros Bence, Fegyverneki Dániel, Sőregi Petra, Daru János, Répási József, Soós Tibor: Észterek szelektív katalitikus redukciója aldehidekké

Tolnai Gergely László, Adamik Réka, Varga Bálint, Csenki János, Nagy Bálint, Gavaldik Regina, Béke Ferenc, Novák Zoltán, Daru János, May Zoltán, Gonda Zsombor: Kosz-kupling: Zsákbamacska AmineCat-tel

Simig Gyula: Emlékezés Lempert Károlyra, a Munkabizottság alapítójára

19:00-20:00 *vacsora*

Május 25. Szerda

7:00-8:50 *reggeli*

8:50-10:10 Elnök: Simig Gyula

József János, Illyés Tünde Zita, Kövér Katalin, Tóth Marietta, Somsák László, Juhász László: Exo-glikál származékok [2+2] cikloaddíciós reakcióinak vizsgálata klórszulfonil-izocianáttal és diklór-keténnel

Nour-Eddine El Alaoui, Mohammed Boulhaoua, Hutai Dániel, Jernei Tamás, Csókás Dániel, Juhász-Emődi Veronika, Szabóné Oláh Rita, Bősze Szilvia, Hudecz Ferenc, Csámpai Antal: Ferrocén-tartalmú piridazinok, köztük antiproliferatív származékok: szintézis, szerkezet, váratlan átalakulások és biológiai aktivitás

Kicsák Máté, Mándi Attila, Czenke Zoltán, Kurtán Tibor: Biaril bisz-izokrománok szintézise és vibrációs cirkuláris dikroizmus vizsgálata

Simon Péter, Lőrinczi Bálint, Szatmári István: Új környezetbarát, one-batch eljárások kidolgozása kinurénsav-származékok szintézisére

10:10-10:40 *szünet*

10:40-12:00 Elnök: Szakonyi Zsolt

Király Sándor Balázs, Mándi Attila, Kurtán Tibor: Heterocikloalkének domino Knoevenagel-gyűrűzárás reakciói

Meiszter Enikő, Gazdag Tamás, London Gábor: Az 1,3-bisz(dimetilamino)-2-azapentalén kémiája

Szlávik Márton Ferenc, Sophia Ben Ahmed, Paczal Attila, Kotschy András: Királis NHC-réz komplexek szintézise és alkalmazása szelektív hidrobtorálási reakciókban

Gyimesi Máté, Szabó András, Málnási-Csizmadia András: MPH-220, az első nagy hatékonyságú vázizom specifikus relaxáns preklinikai és klinikai fejlesztése

12:00-13:40 *ebéd*

13:40-15:30 Elnök: Csékei Márton

Mohácsi Zsombor Márton, Decsi Balázs, Takács Gergő, Márton András Dénes, Dr. Balogh Weiser Diána, Dr. Balogh György Tibor: Gyógyszervegyületek oxidatív metabolitprofiljának biomimetikus szűrési vizsgálata szintetikus metalloporfirin rendszerekben

Kovács Ervin, Csomos Attila, Máthé Domokos, Szalay Gergely, Fülöp Anna, Katona Gergely, Rózsa Balázs, Mucsi Zoltán: Új fluoreszcens fémionszenzorok szintézise és alkalmazása SARS-CoV-2 fertőzés kimutatására

Bárány Péter, Czuczi Tamás, Murányi József, Csámpai Antal: Várhatóan fokozott antiproliferatív aktivitással rendelkező, több molekuláris célponttal kölcsönható új imipridon hibridvegyületek fragmens alapú tervezése, szintézise és jellemzése

Forman Ferenc, Dobi Zoltán, Soós Tibor: Aldehyde redukív éterezése

Németh András György, Szabó Renáta, Ábrányi-Balogh Péter: Elemi kén alapú multikomponensű reakciók fejlesztése izotiocianát intermedieren keresztül

Május 23. Hétfő		Május 24. Kedd		Május 25. Szerda	
11:30-13:30 13:30-15:20 Elnök: Novák Zoltán	ebéd	7:00-8:50	reggeli	7:00-8:50	reggeli
		8:50-10:10 Elnök: Kupai József	Angyal Péter Hegedűs Dóra Sőregi Petra Kollár Levente	8:50-10:10 Elnök: Simig Gyula	József János Csámpai Antal Kicsák Máté Simon Péter
		10:10-10:40	szünet	10:10-10:40	szünet
		10:40-12:00 Elnök: Soós Tibor	Kiss Johanna Kajtár Mihály Pethő Bálint Gazdag Tamás	10:40-12:00 Elnök: Szakonyi Zsolt	Király Sándor Balázs Meiszter Enikő Szlávik Márton Ferenc Málnási-Csizmadia András
		12:00-13:30	ebéd	12:00-13:40	ebéd
15:20-15:50	szünet	13:30-15:30	szünet	13:40-15:30	Mohácsi Zsombor Márton
15:50-17:10 Elnök: Kurtán Tibor	Makra Zsófia	15:30-17:10 Elnök: Volk Balázs	Decsi Balázs	Elnök: Csékei Márton	Mucsai Zoltán
	Lasányi Dániel		Hegedűs Kristóf		Bárány Péter
	Kupai József		Cseri Levente		Forman Ferenc
17:10-17:40	Albitz Krisztián		Khdar Alabdeen Zein		Németh András György
17:40-19:00 Elnök: Timári Géza	szünet	17:10-17:40	Jablonkai István		
	Kalapos Péter		szünet		
	Lőrinczi Bálint	17:40-19:00	Dudás Ádám		
	Mándi Attila	Elnök:	Tolnai Gergely László		
	Sipos Gellért	Kotschy András	Simig Gyula		
19:00-20:00	vacsora	19:00-20:00	vacsora		



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Nemzeti Felsőoktatási Ösztöndíj

Hazai előadás kivonata programfüzet hiányában

2022/2023. tanév

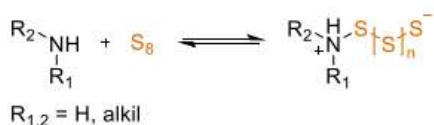
Konferencia neve: Heterociklusos és Elemorganikus Kémiai Munkabizottság ülése

Konferencia helye és ideje: Balatonszemes, 2022. május 23-25.

Az előadás szerzői: Németh András György, Szabó Renáta, Ábrányi-Balogh Péter

Elemi kén alapú multikomponensű reakciók fejlesztése izotiocianát intermediereken keresztül

Az elemi kén egy atomhatékony építőelem kéntartalmú szerkezetek előállítására, környezetbarátabb megoldást nyújtva, mint a hagyományos kénező reagensok. A *Lawesson*-reagens, szén-diszulfid vagy foszfor-pentaszulfid mérgező, nehezen kezelhető kénező reagensok, amelyek rosszabb atomhatékonyaságú és veszélyesebb eljárások megvalósítását teszik csak lehetővé. Az elemi kén egyértelmű előnyei a zöldkémiai elvárásokkal összhangban számos új kémiai eljárás kidolgozásához vezettek. Az egyik leggyakrabban alkalmazott módszer kén aktiválására a kénkorona heterolitikus hasítása nukleofilekkel. Primer és szekunder alifás aminok már szobahőmérsékleten is hatékonyan bontják meg a kén-kén kötéseket, lineáris poliszulfid anion láncokat képezve. Ezekből a poliszulfid láncokból aminokkal akár több mólos koncentrációjú oldatokat is elő lehet állítani (**1. ábra**).



1. ábra: Lineáris poliszulfid anion láncok előállítása kénből primer és szekunder alifás aminokkal

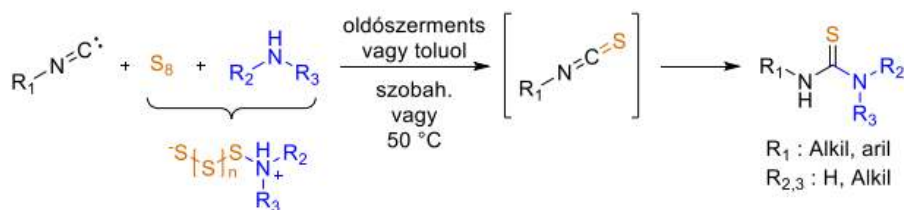
Az izotiocianátok bioaktív, rákellenes hatást is mutató vegyületek, amelyek megtalálhatóak többek között keresztesvirágú zöldségekben, például brokkoliban, karfiolban, káposztában és vízitormában. Változatos és fokozott reaktivitásuk miatt szerves kémiai szintézisekben gyakran alkalmazzák őket intermediereként. Izotiocianátok jellemző reakciója a nukleofil addíció aminokkal, alkoholokkal és tiolokkal, amelyek bioaktív tiokarbamidokhoz, tio- és ditiokarbamátokhoz vezetnek. Izotiocianátokat hagyományosan aminokból állítanak elő tiofoszfénnel vagy szén-diszulfiddal. Ezek az eljárások azonban a nehezen kezelhető és mérgező reagensok alkalmazása mellett csupán szűk funkciócsoport toleranciával szolgáltatják az izotiocianátokat. Elemi kén alkalmazásával azonban izocianidok közvetlen kénezése is megvalósítható termikus körülmények között vagy külső aktiválószerrel jelenlétében (**2. ábra**).

Kalkogének, például szelén és tellúr vagy átmenetifém katalizátorok, például molibdén és ródium hatékonyan katalizálják izocianidok és elemi kén reakcióját. Ezeknek az eljárásoknak a hátránya azonban a mérgező, nehezen hozzáférhető és drága katalizátorok, illetve a jellemzően hosszú reakcióidők alkalmazása.



2. ábra: Izocianidok közvetlen kénezése elemi kénnel izotiocianátokká

Al-Mourabit és munkatársai kidolgoztak egy háromkomponensű eljárást tiokarbamidok szintézisére izocianidokból, elemi kénből és primer, illetve szekunder alifás aminokból kiindulva (**3. ábra**). Feltételezésük szerint a reakció egy izotiocianát kulcsintermedieren keresztül játszódik le, amely a reakcióelegyben lévő izocianidból és az alifás aminnal aktivált kénből képződik. Alifás aminok alkalmazása aktiválószerként azonban nem teszi lehetővé más nukleofilek, például alkoholok vagy tiolok beépítését, így tio- vagy ditiokarbamidok szintézisét sem. Ezen felül az anilinek nem elég nukleofilek ahhoz, hogy hatékonyan aktiválják az elemi ként, így az eljárás csak egy szűkebb kémiai térben alkalmazható. Problémát jelent a kénfeleslegének eltávolítása, amely szükségessé teszi a kromatográfiás tisztítást is, mivel szerves oldószerek nem alkalmasak a kén elválasztására kristályosítási eljárásokban.



3. ábra: Multikomponensű reakció tiokarbamidok előállítására izotiocianát intermedieren keresztül

Budapest, 2022. június 30.

Szabó Renáta
 Szabó Renáta