

14:40 - 14:55	Gubicza Krisztina (CRISPR-Cas12a-assisted endogenous gene tagging)
14:55 - 15:10	Trombitás Tamás (Development of protein-based biosensors for the real-time in vivo detection of nucleotides)
15:10 - 15:25	Vajdovich Dorottya Krisztina (Investigation of pseudo-cereal-based beverages enriched with antioxidants, protein and fibre)
15:25 - 16:00	SZÜNET
16:00 - 17:00	Bodnár Attila (Vízviszaforgató-kertek – új megoldás a fenntartható városi vízellátáshoz)
17:00 - 17:10	szünet
17:10 - 17:25	Szabó Renáta (Tiokarbamidok multikomponensű szintézise elemi kénnel szakaszos és folyamatos körülmények között)
17:25 - 17:40	Ágoston Henrietta (Karbopironin vázas fluorofórok szintézise)
17:40 - 17:55	Buna Levente (Az adamantil-fenil-H-foszfinát rezolválásának és továbbalakításának vizsgálata)
17:55 - 18:10	Varga Bertalan (Benzilidén-ciánecetészter-származékok előállítása aszimmetrikus fázistranszfer körülmények között)
18:10 - 18:25	Teski Tamara (A benzotiadiazepin-2,2-dioxid alapváz és az 5-ös helyzetben fenilcsoportot tartalmazó származék előállítása)

Péntek, Április 16. – „Poszter” csatorna

10:00 - 10:10	szünet
10:10 - 10:20	Vézi Blanka (Acetil-szalícilsav porok és csak hatóanyagot tartalmazó kapszulák kioldódásának jóslása a szemcseméret-eloszlás ismeretében)
10:20 - 10:30	Horváth Livia (Valós idejű spektroszkópiai mérések és kemometriai módszerek alkalmazása gyógyszerkioldódás predikciójára)
10:30 - 10:40	Gadácsi Norbert (Diasztereomer sók közvetlen felhasználásának technológiai lehetőségei)
10:40 - 10:50	Pál Domonkos (Kondroitin-szulfát diszacharidok stabilitási és visszanyerési vizsgálata)
10:50 - 11:00	Balogh Emese (Molekuláris diagnosztikai módszer fejlesztése barna varangy (<i>bufo bufo</i>) ivar-meghatározására RADSeq módszerrel)
11:00 - 11:10	Mikeházi Antal (Referencia vasvegyületek vizsgálata újonnan fejlesztett laboratóriumi nagy energiafelbontású röntgenemissziós spektrométerrel)

FUNKCIONÁLIS MOLEKULAKÉNT ALKALMAZHATÓ SZUBSZTITUÁLT FE(II)-TERPIRIDIN KOMPLEXEK GERJESZTÉST KÖVETŐ RELAXÁCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA

Vancza Andor¹, Papp Mariann¹, Bogdán Csilla¹, Keszthelyi Tamás¹, Vankó György¹

¹Wigner Fizikai Kutatóközpont, 1121 – Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.

A vas(II) koordinációs komplexek elektronszerkezete lehetővé teszi, hogy fénnel való gerjesztés hatására mágneses tulajdonságaik megváltozzanak, ezen keresztül pedig komoly potenciált hordoznak molekuláris kapcsolóként. Egy ligandum, ami alkalmas lehet ilyen komplexek készítéséhez, a terpiridin. Közöséges körülmények között a keletkező gerjesztett állapotok élettartama nem kielégítően hosszú a kapcsolóként való alkalmazáshoz. A kutatás egyik célja ezen élettartam meghosszabbítása, másik célja pedig a gerjesztés során keletkező, mesterséges fotoszintézis során hasznosítható MLCT állapotok vizsgálata.

A gerjesztést követő relaxációs folyamat, ezáltal pedig a funkcionális működés során fontos gerjesztett állapotok élettartama módosítható a terpiridin ligandum különböző szubsztituensekkel történő módosításával. Az előadás során bemutatásra kerül a szubsztituált vas(II)-terpiridin komplexek vizsgálatára alkalmazott ultragyors transziens optikai spektroszkópiás eljárás, illetve a mérési eredmények kiértékelésére alkalmazott módszerek. Az e módszerekkel meghatározott paraméterek ismertetésével bemutatásra kerül a szubsztitúció hatása. Bizonyos, a mérési eredmények alapján meghatározott paraméterek kvantumkémiailag számítások eredményeivel is összevetésre kerülnek.

Referenciák:

- [1] Sárosiné Szemes, D.; Keszthelyi, T.; Papp, M.; Varga, L.; Vankó, Gy.; *Chemical Communications*, **2020**, (79), 11831-11834

TIOKARBAMIDOK MULTIKOMPONENSŰ SZINTÉZISE ELEMI KÉNNEL SZAKASZOS ÉS FOLYAMATOS KÖRÜLMÉNYEK KÖZÖTT

Szabó Renáta^{1,2}, Németh András György^{1,2}, Dr. Ábrányi-Balogh Péter^{1,2}

¹Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Magyar Tudósok Körútja 2.

²Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.

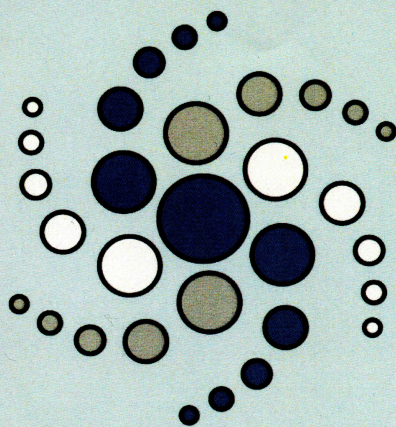
A multikomponensű reakciók fontos részét képezik a modern szerves szintetikus kémia eszköztárának. Segítségükkel komplex szerkezetek állíthatók elő akár egy preparatív lépésben, illetve alkalmasak lehetnek környezetbarát, atomhatékony és biztonságos alternatívát nyújtani, mint a korábban kidolgozott szintetikus eljárások. A természetben nagy mennyiségben előforduló, nem toxikus és könnyen kezelhető elemi kén szerves szintézisekben való felhasználása pedig segít kiváltani veszélyes, mérgező reagenseket, illetve fokozni a reakciók atomhatékonyágát [1].

Munkánk során elemi kénből szerves bázisok segítségével egy poliszulfid anionokat tartalmazó homogén vizes oldatot állítottunk elő, amelyet izonitrilrel és amidin típusú bázissal vagy aminnal reagáltatva változatos szerkezetű tiokarbamidok multikomponensű szintézisére használtunk fel [2]. A kidolgozott módszert változatos szerkezetű izonitrilekre és bázisokra is kiterjesztettük, ezzel megmutatva az eljárás széleskörű alkalmazhatóságát.

Az oldatfázisban aktivált kén előnye, hogy azzal a reakció víz-acetonitril elegyben homogén körülmények között is megvalósítható, így az eljárást sikeresen átvittettük áramlásos kémiai reaktorba is [3]. A módszer előnye, hogy a kénfelesleg eltávolítására elegendő egy vizes extrakció, így nem szükséges további kromatográfiás tisztítást alkalmazni.

Referenciák:

- [1] Nguyen, T. B. *Adv. Synth. Catal.* **2017**, (359), 1066–1130.
[2] Németh, A. G., Szabó, R., Domján, A., Keszű, G. M., Ábrányi-Balogh, P.; *ChemistryOpen*, **2021**, (10), 16-27.
[3] Németh, A. G., Szabó, R., Orsy, G., Mándity, I. M., Keszű, G. M., Ábrányi-Balogh, P.; *Molecules*, **2021**, (26), 303.



Emléklap

Szabó Renáta
részére
a XIV. Szent-Györgyi Albert
Konferencián

Tiokarbamidok multikomponensű szintézise elemi
kénnel szakaszos és folyamatos körülmények között

című előadásának
bemutatásáért.

Hornyánszky Ágnes
.....
Hornyánszky Ágnes
főszervező

Vézi Blanka
.....
Vézi Blanka
BME Szent-Györgyi Albert Szakkollégium
elnök

Lóczy Hanna
.....
Lóczy Hanna
főszervező



2021.04.16-17.