

Összefoglalók
(kémia BSc / vegyész MSc)
2013/2014 I. félév



Készült:
az Eötvös Loránd Tudományegyetem
Kémiai Intézet
Szerves Kémiai Tanszékén

2014

Összeállította Szilvágyi Gábor PhD hallgató

Tartalomjegyzék

<i>Balogh Ádám: Átmenetifém katalizált szekvenciális kapcsolási reakciók vizsgálata.....</i>	4
<i>Czirók Márton Tamás: Kation-π kölcsönhatás szerepe a diszulfid-hidak fotolízisében.....</i>	5
<i>Herczeg György Ádám: Nonafluor-terc-butil-csoporttal szubsztituált mandulasav származékok előállítása.....</i>	6
<i>Horváth Péter: A rendezetlenség szerepe a DR0550 Nudix hidroláz stabilitásában.....</i>	7
<i>Koronka Dániel: Poli(poli(etilén-glikol)-metil-éter-metakrilát-ko-N-vinylimidazol) kopolimerek előállítása és tulajdonságaik vizsgálata.....</i>	8
<i>Molnár Márk: Állati eredetű biomasszából kinyerhető poliszacharidok és származékainak átalakítása mikrohullámú technikával.....</i>	9
<i>Nagy Dániel: Metoterxát tartalmú konjugátumok szintézise.....</i>	10
<i>Szuromi Veronika: Sejtpenetráló kalpain inhibitorok szintézise és vizsgálata.....</i>	11
<i>Tóth Edina Brigitta: Heterogén Cu/Fe katalizátor alkalmazása benzoxazinok szintézisében.....</i>	12
<i>Tóth Tamás: 3-Trimetoxiszilil-propil-metakrilát és N-izopropil-akrilamid kopolimerjei mint szol-gél eljárással előállítható hibrid gélek komponensei.....</i>	13

Átmenetifém katalizált szekvenciális kapcsolási reakciók vizsgálata

Balogh Ádám, vegyész MSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Novák Zoltán** egyetemi adjunktus

Szerves Kémiai Tanszék

Sinai Ádám PhD hallgató

Szerves Kémiai Tanszék

Munkám során olyan hatékony palládium-katalizált átalakítást fejlesztettem ki, amely segítségével benzofurán-, indol- és triazolszármazékok állíthatók elő. A heterociklusos vázak kialakítását kétlépéses trimetilszilil-acetilén segítségével kivitelezett szekvenciális Sonogashira reakció segítségével, egy-üst eljárásban valósítottam meg.

A szekvenciális kapcsolat során a trimetilszilil védő csoport eltávolítására (Si-C kötés hasítására) egy új fluoridforrást, a hexafluorokovosavat (H_2SiF_6) alkalmaztam. A reagens alkalmazása C-Si kötés hasítására újnak számít, hiszen ezt a reagenst eddig csak Si-O kötés hasítására használták. A hexafluorokovosav szilil-csoport eltávolítására elterjedten használt tetrabutil-ammónium-fluoridnál (TBF) sokkal olcsóbb és könnyebben kezelhető.

A benzofuránok és indolok szintézise során aril-jodidokat kapcsoltam palládium- és rézkatalizátorok jelenlétében trimetilszilil-acetilénnel, majd a szintézis következő lépésében H_2SiF_6 segítségével eltávolítottam a szilil védőcsoportot, in situ generálva a következő kapcsolásra alkalmas terminális acetilént. A hármas kötést tartalmazó köztiterméken egy másik aril-jodid jelenlétében újabb kapcsolást hajtottam végre, és az így kialakult belső acetiléneknél spontán gyűrűzárás követően alakulnak ki a megfelelő heterociklusok. A triazolok előállítását a Sonogashira és klikk reakció összekapcsolásával oldottam meg. Ezekben a reakciókban a terminális acetilén köztiterméket szerves azidokkal reagáltatva, klikk reakcióban alakítottuk a megfelelő triazolokká.

Kísérleteim során egy, még nem publikált új vegyületet (1-benzil-4-(2-(trifluormetil)fenil)-1H-1,2,3-triazol) sikerült előállítanom, amelyről ^1H és ^{13}C NMR vizsgálatot is készítettem.

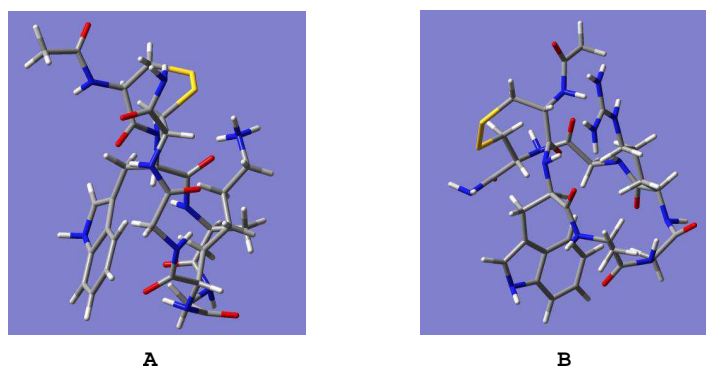
Kation- π kölcsönhatás szerepe a diszulfid-hidak fotolízisében

Czirók Márton Tamás, kémia BSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Deckerné Majer Zsuzsanna** egyetemi docens
Knapp Krisztina Nóra tudományos segédmunkatárs
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

A laboratóriumi munkám során olyan diszulfid-hidat és triptofánt tartalmazó ciklo-heptapeptidet terveztem és állítottam elő, melyben kation - π kölcsönhatás létrejöhet és ez a kölcsönhatás az UV-fény hatására bekövetkező diszulfid-híd fotolízisét befolyásolhatja.



1. ábra: a kiválasztott Lys (A) és Arg (B) tartalmú modellek legkisebb energiájú konformerei

A KSzL csoport korábbi kutatásaihoz kapcsolódva modelleztem, olyan diszulfidhidas ciklo-heptapeptideket, melyekben aromás oldalláncú aminosavak (W, Y, F), Arg vagy Lys volt a szekvenciában.

- 1) A modellvegyületek (MM-módszer) közül a következő két kritérium alapján választottam ki a szintetizálendő heptapeptid modellt:
 - a. az aromás rendszer megfelelő C-atomja (Trp esetén az ϵ_2 C-atom, Phe, Tyr esetén a legtávolabbi C-atom) és az SS-híd távolsága 5-7 Å intervallumban legyen;
 - b. a hattagú aromás gyűrű középpontja és az Arg vagy Lys oldalláncában található legközelebbi N-atom távolsága ~5-6 Å intervallumban legyen.

Ennek megfelelően kiválasztottam két (CM4ciklo és CM5ciklo) ciklopeptidet, melyeknek az előállításával és vizsgálatával igazolni próbáltam a modellezés eredményeit.

- 2) Manuális szilárdfázisú peptidszintézissel (Fmoc-módszer) előállítottam a kiválasztott lineáris peptideket, majd oldatfázisú diszulfidhíd kialakításával ciklizáltam. Azonosításuk MS és HPLC módszerrel történt.
- 3) Vizsgáltam a ciklizált-, a lineáris heptapeptidek és a Trp fluoreszcenciáját is. Összehasonlítva a ciklo- és lineáris heptapeptidek értékeit, nem adódott nagy fluoreszcencia intenzitásbeli különbség közöttük.

További vizsgálatok (UV-B besugárzás, SH-csoportok mennyiségi kimutatása) és modellvegyületek szükségesek annak megállapításához, hogy a kation- π kölcsönhatásnak milyen szerepe van a peptidek, fehérjék fotolízisében.

Nonafluor-*terc*-butil-csoporttal szubsztituált mandulasav származékok előállítása

Herczeg György Ádám, kémia BSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Szabó Dénes**, egyetemi docens
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Szaklaboratóriumi munkám során NMR shift reagensként használható különböző szubsztituált mandulasav nonafluor-*terc*-butil-csoportot tartalmazó származékait állítottam elő Mitsunobu-reakció segítségével.

Az éterszintézisben kiindulási anyagként használt szubsztituált mandulasavakat közepesen jó kitermeléssel sikerült előállítanom a megfelelően szubsztituált acetofenonokból. A karboxilcsoport védeése észtercsoport kialakításával, és a kialakított észtercsoport hidrolízise minden esetben jó kitermeléssel ment végbe. Mitsunobu-reakcióval három nonafluorozott származékot sikerült kicsi kitermeléssel, tisztán előállítanom. A reakció továbbfejlesztése fontos lenne, hogy optikailag aktív reagenst lehessen előállítani. Ehhez további kutatások kellenének.

Az NMR mérésekből az derült ki, hogy a diasztereomer sók metin protonjainak kémiai eltolódás-különbsége csökken, ha a mandulasav benzolgyűrűjén elektronszívó- vagy nagyméretű elektronküldő csoport található. NMR mérések alapján kiszámítható a sóképződés egyensúlyi állandója, így az eredmények a későbbiekben felhasználhatóak lehetnek a rezolválási kísérletek optimalizálásában. Ugyanis ha van párhuzam a rezolváció mértéke és a sóban kimért effektus mértéke között az adott oldószerben, akkor gyorsabb, pontosabb és olcsóbb lehetne a rezolválás. Ehhez további kutatások és mérések lennének szükségesek.

A rendezetlenség szerepe a DR0550 Nudix hidroláz stabilitásában

Horváth Péter, vegyész MSc

Készült: MTA-TTK Enzimológiai Intézet

A védés helye: Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Tantos Ágnes** tudományos munkatárs
MTA-TTK Enzimológiai Intézet
Prof. Dr. Perczel András egyetemi tanár
ELTE-TTK Szerves Kémiai Tanszék

Deinococcus radiodurans egyedülálló az ismert baktériumfajták között az oxidatív stressz elviselésének tekintetében. Az emberi sejt makromolekuláit érintő oxidatív károsodások különféle degeneratív betegségeket okozhatnak mint például rákot vagy öregedést. Az oxidatív stressz kiváltói a reaktív oxigén specieszek (ROS), amik különböző stressz körülményeknek való kitettség során keletkezhetnek. Az *D. radiodurans* extrém, 15,000 Gy besugárzást is képes elviselni. Ez a rendkívüli sugárzással rezisztencia a genom azon javító képességén alapszik, hogy akár több mint 100 duplaszálú DNS törés után is képes mutáció mentesen megőrizni a genom integritását..

A DNS javító mechanizmusok mellett a *D. radiodurans* számos egyéb stratégiát alkalmaz az oxidatív stressz legyőzése és megelőzése érdekében: (i) sejt tisztítás a sérült (oxidált) makromolekulák eliminációján keresztül (ii) néhány fehérje szelektív védelme az oxidatív sérülések ellen (iii) endogén ROS termelés elfojtása és (iv) antioxidáns védekező rendszer. Az oxidált nukleotidokat a Nudix hidrolázok detoxifikálják és újrahasznosítják.

A Nudix szupercsaládot alkotó hidroláz enzimek több, mint 250 fajban megtalálhatóak úgy mint vírusokban, baktériumokban, archeakban és eukariótákban. Valamilyen X molekuláriszlethez kapcsolódó nukleozid difoszfátok hidrolízisét katalizálják, valamint tartalmaznak egy hurok-hélix-hurok szerkezetű Nudix bokszot, ami Mg^{2+} ionokat köt meg, valamint katalitikus site-ként funkcionál.

A fehérje chaperone-ok szubsztrátjaikat különböző stresszhatásokkal szemben védik. A teljesen rendezetlen chaperone-ok molekuláris mechanizmusa összefügg szerkezeti flexibilitásukkal. Azt a modellt, melyben a fehérje rendezetlenség alapvető mechanisztikus szerepet játszik, a chaperone entrópia transzfer modellnek nevezzük.

A Nudix DR0550 rendezetlen N-terminális farok szerepének tisztázása céljából a Nudix N-terminális régióját kódoló DNS-t pET-22b(+) vektorba klónoztam. A rekombináns fehérje kifejeztetésének optimalizálása különböző baktérium törzsek különböző indukciós idő és hőmérséklet variálásával történt. A rekombináns fehérjét affinitás kromatográfiával tisztítottam, a puffercsere méretkizárásos kromatográfiával történt. A trunkált DR0550 (DR0550 az N-terminális nélkül, továbbiakban deltaN) kódoló DNS klónozását a csoport másik tagja végezte. A tisztított fehérjék (deltaN+N-terminális) aktivitását különböző ideig tartó stresszelések után „Phosphate Assay Kit” segítségével végeztem.

Arra a megállapításra jutottam, hogy amikor az N-terminális a deltaN-nel együtt van jelen az oldatban a hőstressszel szembeni tolerancia jelentősen megnövekedett a kontroll mintához képest (deltaN egymagában). Következésképpen a rendezetlen N-terminális régió stabilizálja a hidroláz domain-t. A molekulamodellzés eredményeképpen olyan peptid szekvenciákat kaptunk, amelyek feltételezhetően kötődnek a hidroláz domain-en. In vitro kísérletekben igazoltam a négy peptid közül az egyik esetében a kötő illetve a védőhatást. A védő effektus szerkezeti hátterének pontosabb megértése érdekében további mérések, mint például további cirkuláris dikroizmus vizsgálatok, kötési vizsgálatok, illetve NMR mérések szükségesek.

Poli(poli(etilén-glikol)-metil-éter-metakrilát-*ko*-N-vinilimidazol) kopolimerek előállítása és tulajdonságaik vizsgálata

Koronka Dániel, kémia BSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

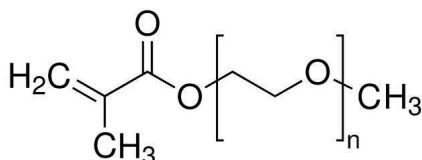
Témavezetők: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, MTA levelező tagja, tudományos osztályvezető

MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

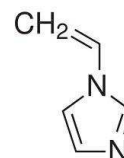
Szabó Ákos tudományos munkatárs

MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Munkám során olyan ko- illetve terpolimereket állítottam elő szabadgyökös polimerizációval, melyek intelligens viselkedést mutatnak. Ez az intelligens viselkedés a vizes oldatban tanúsított alsó szételegyedési hőmérsékletben (LCST) jelentkezik. Az általam használt poli(etilén-glikol)-metil-éter-metakrilátból (PEOMA) és N-vinilimidazolból készített random kopolimerek esetén vizsgálatára még nem került sor, így kutatómunkám célja az volt, hogy megvizsgáljam a monomerarányt, a PEOMA poli(etilén-glikol) oldalláncainak hossza és a közeg pH-ja miként befolyásolja az LCST-t ezen a polimerek esetében.



1. ábra: Poli(etilén-glikol)-metil-éter-metakrilát



2. ábra: N-Vinilimidazol

Munkám első fázisában a különböző összetételű polimerek szintézisét és ¹H-NMR, illetve GPC analízisét hajtottam végre. Munkám második fázisában az eltérő összetétellel és átlag molekulatömeggel jellemezhető polimerek által vizes oldatban mutatott LCST vizsgálatára koncentráltam. Az LCST méréseket desztillált vizes közegen túlmenően pH = 3,00 és pH = 6,00-os pufferoldatokra is kiterjesztettem. Az általam elvégzett kísérletek bizonyítják, hogy az adott hőmérsékleten bekövetkező fázisszeparációs jelenséget (LCST-t) nagymértékben befolyásolja a vizsgált polimer láncba beépült különböző monomerek száma, továbbá a mérés során biztosított pH. Az eredményeim alapján kapott összefüggések hozzájárulhatnak újszerű intelligens polimer anyagi rendszerek tervezésében.

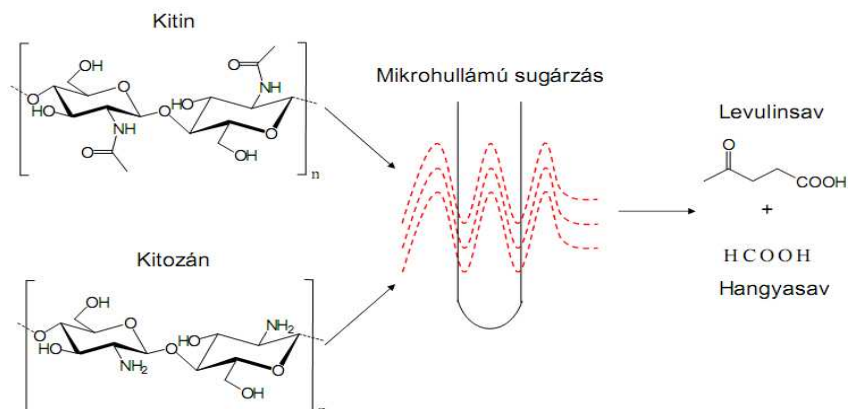
Állati eredetű biomasszából kinyerhető poliszacharidok és származékainak átalakítása mikrohullámú technikával

Molnár Márk, informatikus vegyész

Készült: az ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszékén

Témavezető: Dr. Dibó Gábor egyetemi docens

ELTE TTK, Szerves Kémiai Tanszék



Ma a szerves vegyipar alapanyagainak 90%-át nyerjük fosszilis energiahordozókból (kőolaj, kőszén és földgáz), illetve energiaigényünknek közel a 80%-át is ebből a forrásból fedezzük. Ezek a számok az emberiség népességének gyarodásával egyre csak nőni fognak. Egyszer ezek a nyersanyag- és energiakészletek kimerülnek. Ez az egyik fő ok, amely az alternatív energiaforrásokra irányította a figyelmet. Napjainkban az alternatív energiaforrások (nap-, víz-, szél-, és geotermikus energia és a biomassza) használata igen csekély mértékű. Az alternatív megoldásokon belül, a biomassza, a kémiával foglalkozó szakembereket állítja megoldandó feladat elé. Az egyik fő cél lehet, hogy a biomasszában fellelhető természetes alapú szerves anyagokat olyan vegyületekké (γ -valerolaktonná, levulinsav) alakítsák, amelyekből szerves ipari alapanyagokat nyerhetünk. Ezzel kapcsolatos korábbi kutatások, már történtek Tanszékünkön.

A szakdolgozatom témája, hogy az állati eredetű biomasszából (kitin, kitozán) kinyerhető poliszacharidokat és származékait sav-katalizált hidrolízissel alakítsam át levulinsavvá, mikrohullámú besugárzás segítségével. Napjainkban a szerves kémiai reakciók kivitelezésére egyre elterjedtebb a mikrohullámú technika alkalmazása. A mikrohullámmal kiváltott dielektromos melegítés legfőbb előnye, hogy a hőenergiát sokkal gyorsabban és hatékonyabban veszi át a reakcióelegy. Ennek eredményeképpen a reakcióidő jelentősen csökkenthető, illetve az esetleges melléreakciók várhatóan visszaszoríthatók. A munkám során, az volt a célom, hogy a kitin és kitozán monomerjeit kiindulási modellvegyületekként (N-Acetil-D-glükózamin hidroklorid, D-glükózamin-hidroklorid) választva, elvégezzem a reakcióparaméterek optimalizálását, úgy hogy a lehető legnagyobb levulinsav kitermelést kapjam. Az optimalt reakciókörülményeket, pedig alkalmaztam a kitinre, kitozánra és további származékaikra. Ezután összehasonlítottam az egyes esetekben nyert levulinsav hozamokat, amelyek a legjobb esetekben, kitinnél 37,8%-os, kitozán esetén 37,0%-os volt. Kijelenthetem, hogy az optimalizálás során kapott levulinsav termelések nem maradnak el az irodalomban található hozamoktól, sőt néhol még magasabbak is. Végül elmondhatom, hogy egy olyan eljárást dolgoztam ki, amelyből állati eredetű biomasszából származó poliszacharidokat alakítottam át levulinsavvá korszerű mikrohullámú technikát alkalmazva.

Metotexát tartalmú konjugátumok szintézise

Nagy Dániel, kémia BSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Bánóczy Zoltán**, tudományos munkatárs
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

A természetes peptidek módosítása és a peptidkonjugátumok kifejlesztése egyre fontosabb kutatási terület, melybe beletartozik új hatékonyabb sejtpenetráló peptidek előállítása is. A mostanáig felfedezett sejtpenetráló peptidek ideális hordozó molekulák, mivel a hozzájuk kapcsolt vegyületek képesek bejutni a sejtekbe. A tuftsin [1] tetrapeptid módosításával tumor ellenes szerek hatékonyságát fokozhatjuk, annak konjugátummá alakításával. A módosított tuftsin szekvenciából (TKPRR) felépített 15 aminosavas trimer ideális sejtpenetráló-hordozó molekula. Munkám során azt vizsgáltam, hogy lehetséges-e egyszerre több molekulát konjugálni ezen peptidhez, úgy hogy a sejtpenetráló képesség és a konjugált molekulák biológiai hatása ne romoljon. Munkám során sikeresen előállítottam szilárd fázisú peptidszintézissel, Fmoc/^tBu stratégiát alkalmazva egy olyan konjugátumot, amely az *N*-terminálisán metotexátot, míg a 2. lizin oldalláncában karboxifluoresceint tartalmaz - MTX-TK(CF)PRR-(TKPRR)₂-NH₂. A konjugátum sejtbejutását áramlási citometriával, míg citosztatikus hatását MTT teszttel vizsgáltuk. Ezen konjugátum sejtbejutásának mértéke felére csökkent a trimer molekuláéhoz képest, míg a citosztatikus hatás nagymértékben romlott. Feltételezésünk szerint ezért a karboxifluorescein térbeli közelsége a felelős. Annak vizsgálatára, hogy a jelzőmolekula helyzete befolyásolja-e a sejtbejutást, előállítottam egy olyan származékot, melyben nem az *N*-terminális, hanem a 7. lizin ε-aminocsoportján van a karboxifluorescein. Eredményeink alapján ez a konjugátum mutatta a legrosszabb internalizációs képességet.

Sikerült előállítanom olyan Mtx-peptid konjugátumot, melynek sejtbejutását fluoreszcens jelzéssel vizsgálni tudtunk, és amely hatékonyan jut be a sejtekbe, ahol enyhe citosztatikus hatást is kifejtett. Eredményeink alapján elmondhatjuk, hogy a (TKPRR)₃ trimer peptid esetén a konjugáció helyzete befolyásolja a peptid internalizációs képességét, azaz az egyes aminocsoportoknak eltérő szerepe van a sejtbejutásban. Másrészt, a peptid alkalmas arra, hogy egyszerre két hatóanyagot juttasson a sejtbe, de azok térbeli közelsége gátolhatja biológiai hatásuk kifejtését.

- [1] Cammack R., Atwood T., Campbell P., Parish H., Smith T., Stirling J., Vella F. (2006) Oxford Dictionary of Biochemistry and Molecular Biology second edition: Tuftsin. *Oxford university Press*

Sejtpenetráló kalpain inhibitorok szintézise és vizsgálata

Szuromi Veronika, osztatlan képzéses vegyész szakos hallgató

Készült: az ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszékén

A védés helye: Szerves Kémia Tanszék

Témavezető: **Dr. Bánóczy Zoltán** tudományos munkatárs
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Napjainkban az orvostudomány vívmányinak köszönhetően a lakosság nagy része ér meg magas életkort. Ez az öregkorral járó betegségek arányának növekedését okozta. Több ilyen betegségnél megállapították, hogy kialakulásuk összefüggésbe hozható a kalpain enzimek megváltozott működésével. Számos kutatás folyt, és folyik napjainkban is, az enzimsaláddal.

Az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoportjában már több kalpain inhibitor azapeptidet is előállítottak és megvizsgáltak. Munkám során e kutatásba kapcsolódtam be. A korábban előállított Ac-ThrProLeuAglySerProProProSer-NH₂ azapeptid sejtbejutásának vizsgálatához, előállítottam annak karboxifluoreszeccinnel jelölt változatát. Áramlási citométerrel vizsgáltuk a jelölt peptid MCF-7 emlő tumor sejtekbe való bejutását. A peptid minimális mértékű internalizációt mutatott.

Ahhoz, hogy ezt az azapeptidet intracelluláris kalpain enzim gátlására tudjuk használni, előállítottam a peptid C-terminálisán oktaargininnel meghosszabbított konjugátumát (Ac-ThrProLeuAglySerProProProSer-ArgArgArgArgArgArgArgArg-NH₂) és annak karboxifluoreszeccinnel jelölt származékát is (Cf-ThrProLeuAglySerProProProSer-ArgArgArgArgArgArgArgArg-NH₂). A fluoreszcensen jelölt konjugátum az okatargininnek köszönhetően bejutott MCF-7 emlő tumor sejtekbe.

Vizsgáltuk az oktaarginin tartalmú peptid enzimgátló hatását m- és μ -kalpain, valamint katepszin B enzimen, különböző koncentrációkban. A konjugátum a katepszin B-t nem gátolta még 100 μ M-os koncentrációban sem. Ezzel ellentétben viszont a μ -kalpainat gátolta ($K_i=5,37 \mu$ M), az m-kalpainnál pedig kiemelkedően jó gátlást tapasztaltunk ($K_i=0,21 \mu$ M).

Összességében elmondhatom, hogy az oktaarginin beépítése a molekulába nagymértékben fokozta az azapeptid internalizációját, miközben még a kalpain gátló hatást is jelentős mértékben javította. Ugyanakkor teljesen lerontotta a katepszin B enzim gátlásának mértékét. Ennek köszönhetően sikerült előállítani egy intracelluláris kalpain gátlására alkalmas szelektív és hatékony kalpain inhibitorot.

Heterogén Cu/Fe katalizátor alkalmazása benzoxazinok szintézisében

Tóth Edina Brigitta, kémia BSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Novák Zoltán** egyetemi adjunktus

ELTE Szerves Kémia Tanszék

Sinai Ádám PhD hallgató

ELTE Szerves Kémia Tanszék

Napjainkban a szerves kémiai kutatások egyik legfontosabb irányvonalát az új gyűrűzárási reakciók kidolgozása képezi. A heterociklusos molekulák változatos szintézisét és funkcionálizálását széles körben kutatják a szerves kémia különböző területein. A gyűrűzárási reakciók segítségével különféle heterociklusos vegyületek állíthatók elő, amelyek közül számos vegyület gyógyszerhatóanyagként, illetve növényvédő szerként kerül felhasználásra.

Munkám során benzoxazinok előállításának lehetőségeit vizsgáltam heterogén rézkatalizátor felhasználásával. A laboratóriumunkban korábban már számos reakcióban hatékonynak bizonyult Cu/Fe katalizátor alkalmazhatóságát vizsgáltam benzoxazinok szintézisére oxidatív gyűrűzárási reakcióban.

A vizsgálatokhoz elsőként a kiindulási anyagok szintézisét valósítottam meg, ahol egy jól ismert palládiumkatalizált kapcsolási reakció segítségével 2-(ariletinil)-anilideket állítottam elő. Ezt követően az oxidatív gyűrűzárási reakcióban kapcsolópartnerként jelen lévő jodóniumsók szintézisét végeztem, egy az irodalomban már jól ismert előállítási reakciót alkalmazva.

A gyűrűzárási reakciókhoz szükséges kiindulási anyagok szintézisét követően, különféle elektronküldő, illetve elektronszívó csoportokkal szubsztituált benzoxazin származékokat állítottam elő, vizsgáltam a különböző funkciós csoportok hatását a reakció lefolyására.

Kísérleti eredmények alapján megállapítottam, hogy a korábban már számos reakcióban sikeresen alkalmazott Cu/Fe katalizátor alkalmas benzoxazinok etinilanilidek és diaril-jodóniumsók oxidatív gyűrűzárással történő előállításának katalizálására. Munkám során a kiindulási anyagok szintézise után a reakciónak a körülményeit optimalizáltam, továbbá vizsgáltam a kiindulási anyagokon lévő különböző funkciós csoportok hatását a reakcióra. A kísérleti eredmények alapján levonható az következtetés, hogy a kiindulási anyagokban jelenlévő elektronszívó csoportok lassabb reakciót eredményeznek, illetve a termékek kisebb termeléssel izolálhatóak ezekben az esetekben. Az elektronküldő csoportokkal rendelkező szubsztituensek esetében a reakció hasonlóan viselkedett, mint a szubsztituenseket nem tartalmazó kiindulási anyagokkal. A szubsztituensek hatása jelentősebb abban az esetben, ha a szubsztituensek a jodóniumsón helyezkednek el. Az irodalmi előzmények alapján javaslatot tettünk a reakció mechanizmusára, aminek igazolása további kutatások tárgyát képezi.

3-Trimetoxiszilil-propil-metakrilát és N-izopropil-akrilamid kopolimerjei mint szol-gél eljárással előállítható hibrid gélek komponensei

Tóth Tamás, kémia BSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Iván Béla**, egyetemi magántanár
ELTE TTK, Szerves Kémiai Tanszék
Osváth Zsófia, doktorandusz
ELTE TTK, Szerves Kémiai Tanszék

Az anyagtudományon belül számtalan kutatás foglalkozik az intelligens anyagokkal és ezen anyagok tulajdonságainak vizsgálatával. Ezen belül is a legtöbbet kutatott anyag a poli(N-izopropilakrilamid) (PNIPAAm). Ez egy hőmérséklet érzékeny anyag, melynek sok felhasználási területe van, például gyógyszerhatóanyag leadás, műizom létrehozása stb.

A munkám során előállítottam hibrid kopolimereket N-izopropilakrilamid (NIPAAm) és 3-Trimetoxiszilil-propil-metakrilát (TMSPMA) felhasználásával, amit vizsgáltam $^1\text{H-NMR}$ spektroszkópiával, és megállapítottam, hogy milyen a monomer/komonomer arány. Szol-gél módszer segítségével a kopolimerből géleket állítottam elő, aminek vizsgáltam a duzzadási tulajdonságait.

Előállítottam még szerves kopolimert N-izopropil-akrilamidból (NIPAAm) és N,N'-metilén-bisz-akrilamidból (MBAAM), hogy kiderítsem milyen komonomer koncentrációtól kezdve képződik gél, az így előállított géleknek szintén vizsgáltam a duzzadását.

A PNIPAAm rendelkezik alsó kritikus szételegyedési hőmérséklettel (LCST), ahol a polimer kicsapódik vizes oldatából. Az LCST értékét fényáteresztés méréssel lehet meghatározni. A különböző komonomer arány befolyásolja az LCST értékét, melyet látható spektroszkópiával határoztam meg.

