

## Beszámoló, a XXVIII. Nemzetközi Vegyészkonferenciáról Nagyvárad, 2022. október 27-29.

A hagyományokhoz híven, minden évben a Vegyészkonferencia helyszínéül Erdély egy-egy jelentős városát választjuk, hiszen a szakmai program mellett igyekszünk megismertetni vendégeinkkel az erdélyi városok jellegzetességeit, érdekességeit. Ebben az évben a konferencia Nagyváradon zajlott.

A konferencia csütörtökön délután 17 órától az ünnepi köszöntőkkel vette kezdetét, amelyre a Római Katolikus Püspöki Palota Fix Makerspace termében került sor, mely mindenkinek tetszett és megfelelő felszereltséggel rendelkezett. Bár október vége volt, az ezévi kellemes időjárás lehetőséget teremtett, hogy vendégeink megcsodálják a szintén csodálatosan felújított kertet.

A konferencia ünnepi megnyitóján a bevezető üdvözlő szavak után a vendégeket köszöntötték társszervezeteink vezetői: Dr. Huszthy Péter a MTA Kémia Osztályának képviselője, Simonné Dr. Sarkadi Livia, a MKE elnöke, valamint Dr. Köllő Gábor EMT elnök.



Első plenáris előadónk Császár Attila Géza, a MTA levelező tagja, az Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézetének professzora, aki egy érdekes átfogó előadást tartott a kémiai modellek kialakulásáról és alkalmazhatóságáról *A kémia modelljein innen és túl* címmel. Érdekes előadást hallgathattunk a kémia történetéről, a kémiai modellek fejlődését követve. A modern kémia jelentős része klasszikus mechanikai fogalmakon alapul, a vegyészek évszázadokon keresztül sikeresen alkalmazták ezeket a fogalmakat a kvantumkémiaiban is. Az előadás során bemutatásra kerültek a klasszikus mechanikán alapuló 3D „molekulaszerkezetek”, melyek nagyon jelentősek a bennünket körülvevő anyagi világ megértésében. Az elektronszerkezet-számítások egy ún. egyensúlyi szerkezetet szolgáltatnak, mely félmerev molekulák

esetében jól reprezentálja az effektív alakot. Léteznek kváziszerkezetű molekulák is, melyekre sem az egyensúlyi szerkezet, sem a forgó és rezgő mozgás szétválasztása nem elfogadható. További érdekesség, hogy a könnyű elektronok delokalizációjához hasonlóan sor kerülhet a nehéz magok jelentős térbeli delokalizációjára is. Egy másik fontos fogalom a potenciális energia felület, a reakcióutak és az energiagátak fogalma, amit a kémiai rendszerekben végbemenő reakciók jellemzésére használnak. Jelentős, hogy a reakcióknak a kinetikai és termodinamikai kontroll mellett ismert az alagúthatás kontrollja is. A fejlődés elvezetett a nemkötő, rezonancia állapotokhoz, melyeknek jellemzésére ki kellett fejleszteni a nem-hermitikus kvantummechanikát is. Az elméleti kémiai előadás után, a következő plenáris előadás, melyet Sente Lajos tartott az alkalmazott kutatás területéről mutatott be nagyon jelentős eredményeket, talán a napjainkban mindenkit leginkább érdeklő vírusok elleni küzdelem területéről, melynek címe: *Ciklodextrinek kettős szerepben a vírusok elleni küzdelemben: segédanyag és hatóanyag*. Dr. Sente Lajos, a MTA levelező tagja, a Cyclolab Kft. kutatás-fejlesztési igazgatójának előadásából megismerhettük a cég kutatásait a ciklodextrinek ipari alkalmazási lehetőségeinek területén, kiemelve a ciklodextrinek (CDk) szerepét a vírusok elleni terápiákban. A vírusok elleni küzdelemben a ciklodextrinek kettős szerepet játszanak:

- segédanyagként alkalmasak vírusellenes hatóanyagok formulálására, a molekulák vízdoldékonyságának fokozására, kémiai stabilizálásukra, és célba juttatásukra
- egy másik alkalmazási lehetőség az, amikor a ciklodextrinek önmagukban fejtenek ki hatást vírus ellen, illetve csökkentik azok fertőzőképességét.

A segédanyagként történő használatára legalkalmasabb példa a szulfobutil-éter-BCD-vel (Dexolve®) szolubilizált remdesivir antivirális szer, (a Gilead Sciences terméke). Ezt a hatóanyagot nagy mennyiségű Dexolve-val tudták infúziós terméké (Veklury®) fejleszteni. Sokáig, amíg az oltóanyagok nem kerültek forgalomba, ez a készítmény játszotta a fő szerepet a kórházba került súlyos Covid fertőzött betegek terápiajában.

A ciklodextrinek önmaguk is mutatnak vírusellenes hatásokat, főként azok, melyek hatékony lipid/koleszterin komplexáló, mobilizáló képességgel rendelkeznek. Ezeket több, egymástól független kutatócsoport is hatékonyan találta *in vitro* és *in vivo* az ún. "burkolattal rendelkező", tokos vírusok ellen, mint pl. a HIV-vírus, a SARS-Cov-2 koronavírus és influenza vírusok. A CycloLab Kft. az injektálható minőségű szulfobutiléter béta-ciklodextrint gyárt, amelyet elsősorban intravénás alkalmazásra szánt lipofil gyógyszerhatóanyagok bevitelére alkalmaznak.

A bemutatott előadást nagy érdeklődés övezte, a továbbiakban számos kérdés és beszélgetés formájában folytatódott a ciklodextrinek alkalmazására vonatkozó információcsere.

A következő plenáris előadásból megismerhettük a Debreceni Egyetem Alkalmazott Kémiai Tanszékének legújabb eredményeit a polimerkémia területén. Az előadás címe *Apoláris polimerek tanulmányozása lágyionizációs tömegspektrometriával*. Az előadás, melyet Dr. Nagy Lajos mutatott be, az apoláros polimerek (pl. poliizobutilén és polietilén), valamint ezen polimerek különböző funkcionális csoportot tartalmazó származékainak vizsgálati eredményeit ismertette. A polimerek vizsgálata a lágyionizációs tömegspektrometriás módszerekkel (pl. APPI, ESI, DART) negatív és pozitív ionmódban történt. A kutatás során sikerült meghatározni az optimális ionforrás paramétereket. Negatív ionmódban anionnal (pl. kloridionnal) képzett addukt ionok jelennek meg, ugyanakkor karboxil végcsoport esetén deprotonálódásra is lehetőség van. A kloridionnal vagy más anionnal képzett addukt

ionok nem alkalmasak tandem tömegspektrometriás vizsgálatokra, így további szerkezeti információk kinyerésére. Ugyanakkor pozitív ionmódban a hidrogénionnal vagy az ammónium ionnal képzett adduktok tandem tömegspektrometriával jól tanulmányozhatók. A végzett kutatások hozzájárulnak az apoláris polimerek tulajdonságainak megismeréséhez.

A plenáris előadások végén, a résztvevők egy érdekes kisfilmet néztek meg az erdélyi földgáz felfedezéséről. A kisfilm az EMT által tudománytörténeti rövidfilmek készítésére elnyert pályázat keretén belül valósult meg. A filmet *Miholcsa Gyula*, elismert Heves Endre-díjas erdélyi magyar szerkesztő, operatőr, dokumentumfilm-rendező készítette. A film alapjául szolgáló cikk szerzője Wanek Ferenc. A kisfilm címe: *Az erdélyi földgáz felfedezésének igaz története*. A bemutatott film tematikája a földgáz, napjainkban nagyon jelentős, hiszen sokat hallunk, olvasunk a jelenlegi energiaproblémákról, a földgáz lelőhelyeiről, gazdasági jelentőségéről. A videóból megtudhatjuk és láthatjuk azokat a helyeket, ahol már 1612-ben megfigyelték a sós víz fortyogása mellett, hogyan ég a feltörő gáz. Sajnálatosan, az erdélyi földgáz kitermelésére és felhasználására még évszázadokat kellett várni. Büszkék lehetünk, hogy itt Erdélyben található a világ egyik legmagasabb tisztaságú földgáza (99% felett metán gázt tartalmaz). A napot egy kellemes hangulatú állófogadás zárta, mely lehetőséget teremtett az ismerkedésre, szakmai beszélgetésekre.

A következő napon, pénteken a Vegyészkonferencia előadásai a *Continental* szállodában zajlottak, a már megszokott szekciókban. A doktorandusz plénum keretén belül 17 előadás került bemutatásra. Ebben az évben is a fiatalok előadásait kérdések követték, a zsüri figyelő tekintete mellett, hiszen a doktoranduszok között zajlik.

A résztvevők, a délutáni előadásokat két szekcióban hallgathatták. Ebben az évben a poszttereket kivételesen láthattuk, a diákok röviden bemutatták posztereiket az elbíráló bizottság előtt.



A szakmai előadások kivonatait, a poszttereket és fényképeket megtekinthetik a konferencia honlapján, a <http://chem.emt.ro> címen. Ebben az évben a következő eredmények születtek:

## Doktorandusz plénum:

**Dargó Gyula (BME)** – MKE által felajánlott díj, MKE konferencia részvétel 2023-ban  
**Kapus István (Debreceni Egyetem)** – EMT által felajánlott díj, Vegyészkonferencia részvétel 2023-ban

**Bebesi Tímea (Természettudományi Kutatóközpont)** – MKE különdíj /  
Kolloidkémiai és Nanotechnológiai Szakosztály díja (20.000 Ft)

**Szeredai Bettina Dóra, (BBTE)** – a Varga József Alapítvány különdíja (30.000 Ft)

## Diák-poszter szekció:

**I. díj Richter Dóra (BME)** – a Magyar Természettudományi Társulat Kémia Szakosztálya által felajánlott díj (20.000 Ft)

**II. díj Csete Tímea (BBTE)** – oklevél

**III. díj Márta Viktória (SZTE)** – oklevél

**Nagy Loránd (BBTE)** – a Kolozsvári Magyar Kémikusok Egyesülete különdíja (a legjobb önálló diák poszter munkáért) pénzjutalom+oklevél



A szakmai bemutatókat ünnepi díszvacsora zárta, ahol mindenki kicsit fáradtan, de jókedvűen vett részt a beszélgetésben, táncban. A rendezvény zárónapján a résztvevők, városi sétán vettek részt, ahol megismerhették a felújított Nagyváradi jelentős épületeit, templomait.

Jövőre újra találkozunk, mindenkit szeretettel várunk!

Majdik Kornélia  
a Vegyészkonferencia elnöke  
az EMT Kémia Szakosztályának elnöke