

# HETEROCIKLUSOS FAHÉJSAVAK SZTEREOSZOLETKTÍV SZINTÉZISE ÉS ÖNSZERVEZŐDŐ SAJÁTSÁGAIK

PhD Tézisek

**CSANKÓ KRISZTIÁN**



Témavezetők: DR. PÁLINKÓ ISTVÁN

DR. SIPOS PÁL

Kémia Doktori Iskola

Anyag és Oldatszerkezeti Kutatócsoport

Szerves Kémiai Tanszék

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Természettudományi és Informatikai Kar | Szegedi Tudományegyetem

Szeged

**2015**

## 1. BEVEZETÉS

A *fahéjsav* (*E-3-fenilpropénsav*) egy jól ismert vegyület, amely megtalálható a *fahéjban*, amit már az ősi egyiptomi hieroglifák is említenek (Krisztus előtt 2000 körül). A *Cinnamomum Verum* növény (ami *Sri Lankán* őshonos) leveleinek és kérgének illóolaja, elsősorban *fahéjaldehidet* tartalmaz (50–80%), emellett főleg észterek és terpének alkotják. A *fahéjat* (ami a növény kérge) és annak illóolaját évezredek óta alkalmazzák ételek ízesítésére és tartósítására is, köszönhetően a patogén és felső légúti gyulladásokat kiváltó (pl. *Pneumococcus baktérium*) baktériumokra kifejtett antibiotikus hatásának, ami elsősorban a *fahéjsav*-származékokhoz köthető. Amint említettem, a *fahéjsav* megtalálható a *fahéjban*, köszönhetően a *fahéjaldehid* levegőn történő, lassú oxidációjának.

A *fahéjsavat* *W.H. Perkin* szintetizálta először 1868-ban, ennek ellenére alkalmazása a második világháborúig váratott magára, ahol első ízben készült, *cinnamát észter* tartalmú UV-sugárzás ellen védő krém, a csendes-óceáni régióban harcoló katonák részére. A második jelentős áttörés a *fahéjsavak* alkalmazásában, a 80-as évek végén történt, a MALDI-MS technika magalkotása kapcsán amikor, mint mintamátrixot alkalmazzák a *fahéjsavat* és származékait, köszönhetően jelentős elnyelésüknek az UV-tartományban (az átlagos moláris abszorbancia érték  $19556 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$  körül mozog).

A *fahéjsavak* és *heteroatomot* tartalmazó származékaik azért kerültek kutatócsoportunk érdeklődésének középpontjába, mivel alkalmas modellvegyületek a *hidrogénhíddal* összetartott rendszerek tanulmányozására szilárd- és oldatfázisban is. Kísérleteink azt mutatták, hogy valóban képesek különböző összetettségi szintű rendszereket kialakítani. Munkánk során bebizonyosodott, hogy az alapvető építőegység a kettős *hidrogénhíddal* összetartott dimer, míg a magasabb szintű rendeződést, gyengébb (aromás)C–H...X (ahol: X = O, N, S) *hidrogénhidak* okozzák.

Kísérleteink során elsősorban spektroszkópiai és számítási kémiai módszerek kombinációját alkalmaztuk a molekulaszervezet és a szerveződés vizsgálatára.

Munkám kezdetén az alábbi célokat tűztük ki:

1. Gazdaságos szintetikus út keresése, sztereokémiaailag tiszta *E-2 és/vagy 3-(fural/tienil/piridil/szelenofenil)fahéjsavak* előállítására.
2. Elegáns és megfizethető előállítási mód kifejlesztése a kereskedelmi forgalomban nem hozzáférhető *Z-2 és/vagy 3-(fural/tienil/piridil/szelenofenil)fahéjsavakra*.
3. A fenti vegyületek és más származékok önszerveződő képességének vizsgálata szilárd kristályos formában, oldatban és fémfelületeken (*arany és ezüst*), adszorbeált állapotban, a lehetséges másodrendű kötőerők azonosítása sokféle spektroszkópiai ( $^1\text{H}$  NMR, IR) és felületvizsgálati (SEM, AFM, IRM) módszer kombinálásával.
4. A kísérleti eredmények alátámasztása számításmódszerekkel, magas elméleti szinten (geometriai és energia adatok számolása az aggregátumokra, a diszkrét monomerek, ill. dimerek teljes konformációanalízisének).

## 2. KÍSÉRLETI RÉSZ

### Felhasznált anyagok és szintézisük

Munkám kezdetén a következő anyagok álltak rendelkezésemre: *E*- és *Z*-2-fenil-3-(2-tienil)propénsav, *E*- és *Z*-2,3-di(3-tienil)propénsav, *E*- és *Z*-2-fenil-3-(3-tienil)propénsav, *E*- és *Z*-2,3-di(2-tienil)propénsav, *E*- és *Z*-2-(2-tienil)-3-fenilpropénsav, *E*- és *Z*-2-(2-tienil)-3-(3-tienil)propénsav, *E*- és *Z*-2-(3-tienil)-3-fenilpropénsav, *E*- és *Z*-2-(3-tienil)-3-(2-tienil)propénsav. Minden származék a módosított *Perkin* kondenzációs reakció segítségével készült, a megfelelő aromás aldehyd és aromás ecetsav reakciójával, ecetsav anhidrid és trietilamin keverékében, 1 óra reakcióidővel 100°C-on. A keletkezett *E*-*Z* izomer keverék oszlopkromatográfiával választható szét, *Normasil 60 szilikagélen*.

A következő heterociklusos fahéjsavakat: *E*-3-(2 és 3-furil)propénsav, *E*-3-(2 és 3-tienil), *E*-3-(2-szelenofenil)propénsav és az *E*-3-(2,3 és 4-piridil)propénsavakat a módosított *Knövenagel-Döbner* kondenzációval állítottuk elő a megfelelő aromás aldehyd és malonsav reakciójával, piridinben, piperidin katalizátor jelenlétében. A reakció 100% *E* szelektivitást mutatott, kitűnő kitermeléssel: >95%.

A megfelelő *Z*-izomerek előállítására két különböző módszert alkalmaztunk: az első az *E*-izomerek (0,05 M-os *etil-acetátos* oldatban) fotoizomerizációja volt 1 W teljesítményű, 254 nm emissziós maximummal rendelkező UV sugárforrás segítségével, 12 órányi besugárzást alkalmazva. A másik módszer egy hétlépéses szintézis volt, ahol a *Horner-Wadsworth-Emmons* (HWE) féle olefinszintézist alkalmaztuk *Z*-szelektív *Ando-foszfónát* (*bisz-o-krezil-metilfoszfonoacetát*) felhasználásával. A szintézis *metil-kloroacetátból* indul ki, amit *metil-jodoacetáttá* alakítunk *nátrium-jodiddal*,  $S_N2$  szubsztitúciós reakcióban. A keletkezett anyagot *trimetil-foszfittal* reagáltatjuk, kihasználva az *Arbuzov* reakciót, így *trimetil-foszfonoacetátot* kapunk, ami egyben a „tradicionális” HWE reagens is. A következő lépés a *metilcsoportok* cseréje *trimetil-szilil-csoportra*, *trimetilszilil-kloriddal*, ami továbbalakítható a megfelelő *metil-diklorofoszfonoacetáttá*, *oxalil-kloriddal*. Az *Ando* reagenst *o-krezollal* történő észteresítéssel állítjuk elő az előző termékből, *trietilaminban*, *4-dimetilaminpiridin* (DMAP) jelenlétében. Az utolsó lépés maga a kondenzáció, amit mély hőmérsékleten (-78°C) hajtottunk végre, *tetrahidrofuránban* (THF), a megfelelő tisztított aldehyddel és *t-butoxi káliummal*, majd a

keletkezett *metilésztert* THF/KOH keverékében elhidrolizáltattuk. Az átlagos szelektivitás 90:10 Z:E, a konverzió pedig >90%.

Az  $\alpha$ -szubsztituált származékok előállítására a módosított *Perkin* kondenzációt alkalmaztuk *3-piridincetsav* és *benzaldehyd* között, ami *Z-2-(3-piridil)-3-fenilpropénsavat* eredményez, és a *HWE* reakciót *2-fenil-trimetilfoszfonoacetát* és *3-piridinaldehyd* között, (az említett reakciókörülmények mellett) mellyel *E-2-fenil-3-(3-piridil)propénsav* állítható elő.

### Szerkezetvizsgálat és szerkezetképző sajátságok

Az előállított vegyületek szerkezetvizsgálatát  $^1\text{H}$  *mágneses magrezonancia spektroszkópiával* (NMR) végeztük, egy Bruker Avance 500, 500 MHz-es spektrométeren, 99 atom %-os  $\text{CDCl}_3$ ,  $\text{CD}_3\text{OD}$ ,  $\text{D}_2\text{O}$ , vagy  $\text{DMSO-d}_6$  oldószerekben.

A szerkezetképző sajátságait *infravörös spektroszkópiával* (IR) vizsgáltuk szilárd- és folyadékfázisban, *kloroformot* és *dimetil-szulfoxidot* (DMSO) alkalmazva. A mérésekhez, egy Bio-Rad FTS 60-A FT-IR spektrométert alkalmaztuk. Minden spektrumot  $4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$  között rögzítettem,  $4\text{ cm}^{-1}$  felbontás mellett, 256 spektrumakkumulációt végezve. Számos mérés technikát alkalmaztuk a kristályos minták vizsgálatára, többek között a *gyengített teljes reflexió* (ATR) módszerét, ill. az 1%-os *kálium-bromid* pasztillás eljárást, valamint folyadékfázisú mérések esetén transzmissziós elrendezést és *nátrium-klorid* küvettát alkalmazva (0,2 mm folyadékfilm vastagság mellett) a 0,001–0,1 M koncentrációtartományban.

A *hidrogénhidakat* telített DMSO oldatban tanulmányoztuk,  $^1\text{H}\text{--}^1\text{H}$  *korrelációs spektroszkópiát* (COSY) alkalmazva, míg a konformációs állapotokat híg oldatban (0,05 M) *nukleáris Overhauser effektus spektroszkópiával* (NOESY) vizsgáltuk, 16–64 akkumulációt végezve mind a COSY mind a NOESY spektrumokra,  $1024\times 512$  felbontás mellett.

Az esetleges réteges szerkezetet (*por*) *röntgen diffraktometriával* (XRD) vizsgáltuk. A diffraktogramokat a  $2\theta = 5\text{--}35^\circ$  tartományban rögzítettem, egy Rigaku Miniflex II készüléken, a  $\text{CuK}\alpha$  ( $\lambda = 1.5418\text{ \AA}$ ) vonalán, *Bragg-Brentano* elrendezésben. A reflexiók pontos helyzetét Gauss típusú függvények illesztésével határoztam meg. A reflexiók pozíciói  $0,05^\circ$  ( $2\theta$ ) pontossággal reprodukálhatóak voltak.

Az önszerveződés vizsgálatához, 100 nm rétegvastagságú polikristályos fémfelületeket készítettünk *lézeres párologtatással* (PLD). A mérésekhez  $30\times 30$  mm-es üveg

tárgylemezeket használtam fel hordozóként és 99,99%-os *arany* és *ezüst* (Good Fellow) tömböket céllemezként. Az alkalmazott lézer, egy *kripton-fluorid* (KrF) excimer lézer ( $\lambda = 248 \text{ nm}$ ), mellyel  $5 \text{ mm}^2$ -es területre fókuszáltunk. Egy impulzus hosszúsága  $18 \text{ ns}$ , az ismétlés frekvenciája  $10 \text{ Hz}$ , az impulzus energiája pedig  $106 \text{ mJ/impulzus}$  volt.

A fémfelületeket, a vizsgált molekulák  $0,001\text{M}$ – $0,1 \text{ M}$  koncentrációjú *kloroformos* oldatával kezeltem  $48 \text{ órán}$  keresztül. A lemezeket *infravörös mikrospektroszkópiával* (IRM) vizsgáltam, hogy megállapítsam a megkötődés sikerességét. A méréseket, egy Bruker Vertex 70 IRM készüléken végeztünk, teljes reflexiós üzemmódban, a fókuszpontban található felületről ( $1$ – $0,1 \text{ mm}^2$ ). Ahhoz hogy megfelelő válaszjelet kapjunk, egy cseppfolyós *nitrogénnel* hűtött MCT detektort alkalmaztunk. A spektrumok  $1024$  akkumulációval készültek,  $2 \text{ cm}^{-1}$  felbontással, a  $4000$ – $400 \text{ cm}^{-1}$  tartományban. Az önszerveződő rétegek topológiáját *atomi erő mikroszkópiával* (AFM) térképeztük fel, egy NT-MDT Solver AFM mikroszkóp segítségével, a „letapogatás” technikáját alkalmazva (a konzol frekvenciája  $278 \text{ kHz}$  volt). Az AFM tű (melyet a Nanosensors, gyártott) egy SSS-NCH-típusú  $15 \text{ }\mu\text{m}$  hosszúságú *szilíciumtű* volt  $10^\circ$ -os nyílásszöggel és  $2 \text{ nm}$ -es görbületi sugárral.

A tanulmányozott molekulákat a *Hyperchem 8* és a *Gaussian 09'* kvantumkémiai programcsomagok segítségével modelleztük. A diszkrét *fahéjsav* monomerekre teljes konformációanalízist végeztünk HF/6-31G(d,p) szinten, az  $\alpha$ -szubsztituált származékokra pedig PM6 szinten. A legalacsonyabb energiájú monomereket, magasabb (B3LYP/CBSB7) elméleti szinten optimalizáltuk. A kettős *hidrogénhíddal*, ill.  $\pi$ -stacking kölcsönhatással összetartott dimereket az optimalizált monomerekből építettünk fel, majd az optimalizált dimerekből az esetleges tetramereket is modelleztünk. A multimerekre pontos energiákat számoltam, korrigálva a *bázisok szuperpozíciós hibáját* (BSSE), így releváns kötési energiákat kaptunk, amik összehasonlíthatóak a kísérleti eredményekkel.

### 3. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

#### T 1. Általános szintetikus utat találtunk és azt optimalizáltuk *E-3-heterociklusos fahéjsavak* előállítására.

T 1.1. A módosított *Knövenagel-Döbner* kondenzáció általánosan alkalmazható, olcsó és rugalmas eljárásnak bizonyult, alapvető *heteroaromás E-3-fahéjsavak* szintézisére, magas hozammal (>95%) és 100% *E* szelektivitással, különös tekintettel a *piridilfahéjsavakra*.

#### T 2. Az UV fotoizomerizáció hatékony eljárásnak bizonyult, a megfelelő *Z*-izomerek elfogadható kitermeléssel történő előállítására.

T 2.1. Megfizethető, automatikus, félfolyamatos üzemű UV fotoreaktort terveztünk, az *E-heteroaromás fahéjsavak* izomerizációjának tanulmányozására.

#### T 3. Kiemelkedően olcsó eljárást dolgoztunk ki a *Z*-szelektív *Horner-Wadsworth-Emmons olefinszintézisben* alkalmazott *szubsztituált foszfono-acetátok* előállítására.

T 3.1. A sztérikus gátlással bíró *Still-Gennari* és *Ando-foszfonátokat*, alapvető kémiai reakciók újszerű kombinációjával állítottuk elő, melyekkel a tanulmányozott *Z-heteroaromás fahéjsavak* sikeresen szintetizálhatóak, kitűnő termeléssel (>90%) és sztereoszelektivitással (90:10, *E*:*Z*).

T 3.2. Az optimalizált eljárás igen hatékornak bizonyult az  $\alpha$ -szubsztituált *fahéjsav* származékok előállítására, különös tekintettel a *piridilgyűrűt* tartalmazó változatokra.

#### T 4. Összetett szerkezetvizsgálati módszert dolgoztunk ki a tanulmányozott molekulák közt kialakuló másodrendű kémiai kötőerők azonosítására.

T 4.1. Első közelítésben *infravörös spektroszkópiát* alkalmaztunk, szilárd- és oldatfázisban (aprotikus oldószerben) az erős  $O-H\cdots O=C$  *hidrogénhidak* és a gyengébb  $C-H\cdots S=C$  kötések azonosítására.

T 4.2.  $^1H-^1H$  *korrelációs spektroszkópiát* használtunk az oldatban kialakuló (aromás) $C-H\cdots X-(aromás)C$  ( $X = O, N, S, Se$ ) hidrogénkötések azonosítására.

T 4.3. A (por)*röntgen diffraktometriát* alkalmas módszernek találtuk az esetleges  $\pi$ -stacking kölcsönhatások felderítésére.

**T 5. Egy komplex módszert dolgoztunk ki az önszerveződő rétegek tanulmányozására, polikristályos fémfelületeken.**

**T 5.1.** Egyszerű eljárást találtunk polikristályos *arany-* és *ezüstfelületek* előállítására (*lézeres párologtatás* módszere), valamint a molekulák felületen történő megkötésére (*dip-coating* technika).

**T 5.2.** Sokféle szerkezetvizsgálati módszert alkalmaztunk a felületek vizsgálatára, többek közt *pásztázó elektronmikroszkópiát* a kezeletlen fémfelületekre, *infravörös mikroszkópiát* a megkötődés igazolására és *atomi erő mikroszkópiát* a molekularétegek rendeződésének és vastagságának meghatározására.

**T 6. Önálló, automatikusan működő konformergenerátor és adatfeldolgozó szoftvert (Quantum Hyppo v1.0 és Izzy Reader v1.0) készítettünk és illesztettük a Gaussian 09' programcsomaghoz.**

**T 6.1.** A programok segítségével felderítettük a *fahéjsavak* potenciálfelületét; magas (HF/6-31G(d,p)) elméleti szinten és alacsonyabb (PM6) szinten elvégeztük az  $\alpha$ -szubsztituált származékok konformáció analízisét is.

**T 6.2.** Ezen felül pontos energiákat és geometriai adatokat számoltunk számos másodrendű kötőerőkre, beleértve az erős és gyenge *hidrogénhidas* kötéseket és a  $\pi$ -stacking kölcsönhatást is.



#### 4. AZ EREDMÉNYEK GYAKORLATI HASZNOSÍTÁSA

Az itt bemutatott eredmények főként alapkutatási jelentőségűek. Mindazonáltal a *fahéjsavak* és  *$\alpha$ -szubsztituált* származékaik számos felhasználási lehetőséget kínálnak. Az értekezésben sokféle önszerveződő tulajdonságot mutattunk be, különös tekintettel fémfelületeken, ahol a folyamat már szobahőmérsékleten is végbemegy. Ez a tulajdonság valószínűleg felhasználható a korrózióvédelemben, illetve az alaplemezek érzékenyítésére nyomtatott áramkörök előállításánál. Érdemes kiemelni még a lehetséges gyógyszerészeti felhasználásukat is.

## 5. KÖZLEMÉNYEK

### 5.1 Az értekezés témaköréhez kapcsolódó, referált folyóiratban megjelent közlemények

[1] **Csankó, K.**, Darányi, M., Kozma, G., Kukovecz, Á., Kónya, Z., Sipos, P. Pálinkó, I.:

Self-assembling of *Z*- $\alpha$ -pyridylcinnamic acid dimers over polycrystalline Ag and Au surfaces followed by FT-IR and atomic force microscopies,

*J. Mol. Struct.* 993, 67–72 (2011).

IF: 1.551<sub>2011</sub>

IH: –

[2] **Csankó, K.**, Illés, L., Felföldi, K., Kiss, J.T., Sipos, P., Pálinkó, I.:

C-H...S hydrogen bonds as the organising force in 2,3-thienyl- and phenyl- or 2,3-dithienyl-substituted propenoic acid aggregates studied by the combination of FT-IR spectroscopy and computations,

*J. Mol. Struct.* 993, 259–263 (2011).

IF: 1.551<sub>2011</sub>

IH: 5

[3] **Csankó, K.**, Forgo P, Boros, K., Hohmann, J., Sipos, P., Pálinkó I.:

Conformational properties of  $\alpha$ -pyridyl-substituted cinnamic acid studied by NMR measurements and computations,

*J. Mol. Struct.* 1044, 286–289 (2013).

IF: 1.599<sub>2013</sub>

IH: –

[4] **Csankó, K.**, Kozma, G., Valkai, L., Kukovecz, Á., Kónya, Z., Sipos, P., Pálinkó, I.:

Self-assembling of 2,3-phenyl/thienyl-substituted acrylic acids over polycrystalline gold,

*J. Mol. Struct.* 1044, 32–38 (2013).

IF: 1.599<sub>2013</sub>

IH: –

[5] **Csankó, K.**, Ruusuvoori, K.I., Tolnai, B., Sipos, P., Berkesi, O., Pálinkó, I.:

Structural features of pyridylcinnamic acid dimers and their extended hydrogen-bonded aggregations, *J. Mol. Struct.*, in press, doi:10.1016/j.molstruc.2014.11.041, (2014)

IF: 1.599<sub>2013</sub>

IH: –

## 5.2 Az értekezés témaköréhez kapcsolódó, konferenciakiadványban megjelent teljes közlemények

[1] **Csankó, K.**, Kozma, G., Kukovecz, Á., Kónya, Z., Sipos, P., Pálinkó, I.: Kéntartalmú fahéjsav-analógok önszerveződése arany és ezüstfelületeken (Self-assembling of S-containing cinnamic acid analogues over gold and silver surfaces), *Kémiai Előadói Napok (Chemistry Lectures), (Book of abstracts)*, ISBN 978-96-331-5062-7, pp. 190–194 (2011).

## 5.3 Az értekezés témaköréhez kapcsolódó konferencia megjelenések

[1] **Csankó, K.**, Darányi, M., Kozma, G., Kukovecz, Á., Kónya, Z., Pálinkó, I.: Self-assembling of Z- $\alpha$ -pyridylcinnamic acid dimers over polycrystalline Ag and Au surfaces followed by FT-IR and atomic force microscopies, *30th European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 30)*, Florance (Italy), 2010, OR-3-A-B-1, (Book of Abstracts), p. 158. (Oral presentation)

[2] **Csankó, K.**, Kozma, G., Kukovecz, Á., Kónya, Z., Sipos, P., Pálinkó, I.: Kéntartalmú fahéjsav-analógok önszerveződése arany és ezüstfelületeken (Self-assembling of S-containing cinnamic acid analogues over gold and silver surfaces), *Kémiai Előadói Napok (Chemistry Lectures), Program és előadásösszefoglalók (Book of abstracts)*, Szeged (Hungary), 2011, p. 190. (Oral presentation)

[3] **Csankó, K.**, Kozma, G., Valkai L., Kukovecz, Á., Kónya, Z., Sipos, P., Pálinkó, I.: Self-assembling of 2,3-phenyl/thienyl-substituted acrylic acids over polycrystalline gold, *31st European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 31)*, Cluj-Napoca (Romania), 2012, (Book of abstracts) p. 69. (Oral presentation)

[4] **Csankó, K.**, Kukovecz, Á., Kónya, Z., Sipos, P., Pálinkó, I.: Self-assembling capabilities of S- and N-containing cinnamic acid derivatives in solution and over polycrystalline metal

surfaces, *19<sup>th</sup> International conference on chemistry (ICC 19)*, Baia Mare (Romania), 2013, (Book of abstracts) p. 22. (Oral presentation)

[5] **Csankó K.** Pálincó I., Sipos P. Berkesi O.: Self-assembling capabilities of heterocyclic cinnamic acid, *1<sup>st</sup> Innovation in Science – Doctoral Student Conference*, Szeged, (Hungary), 2013, (Book of abstracts), p. 38. (Oral presentation)

[6] **Csankó K.**, Sipos P., Pálincó I.: Structural features of pyridylcinnamic acids and their extended hydrogen-bonded aggregations, *32<sup>nd</sup> European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 32)*, Düsseldorf (Germany), 2014, HB12.6. (Oral presentation)

[7] **Csankó, K.**, Kozma, G., Valkai, L., Kukovecz, Á., Kónya, Z., Sipos, P., Pálincó, I.: Supramolecular organisation of 2,3-phenyl/thienyl-substituted acrylic acids over polycrystalline Au surface, *7<sup>th</sup> International. Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC-7)*, Dunedin (New Zealand), 2012, (Book of abstracts) p. 177. (Poster)

[8] **Csankó, K.**, Forgo, P., Boros, K., Hohman, J., Sipos, P., Pálincó, I.: Conformational properties of  $\alpha$ -pyridyl-substituted cinnamic acid studied by NMR measurements and computations, *31<sup>st</sup> European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 31)*, Cluj-Napoca, (Romania), 2012, (Book of abstracts) p. 322. (Poster)

[9] **Csankó K.**, Tolnai B., Sipos P., Berkesi O., Pálincó I.: Structural features of heteroatom-containing cinnamic acid dimers and their extended, hydrogen-bonded aggregates, *9<sup>th</sup> European Conference on Computational Chemistry (EUCCO-CC9)*, Sopron, (Hungary), 2013, (Book of abstracts) P-48. (Poster)

[10] **Csankó K.**, Kozma G., Kónya Z., Kukovecz Á., Sipos P., Pálincó I.: Self-assembling capabilities of furyl-, thienyl-, and pyridyl-substituted cinnamic acid derivatives over

polycrystalline gold and silver surfaces, *4<sup>th</sup> International Colloids Conference (Colloids 2014)*, Madrid (Spain), 2014, P3.46 (Poster)

**[11] Csankó K., Sipos P., Pálinkó I.:** Stereoselective synthesis of heterocyclic cinnamic acids, *12<sup>th</sup> International Conference of Young Chemists (Youngchem 12)*, Szczecin, (Poland), 2014, (Book of abstracts) p. 80. (Poster)

#### **5.4 Az értekezés témaköréhez nem kapcsolódó, referált folyóiratban megjelent közlemények**

**[1] Csankó, K., Sipos, P., Pálinkó, I.:**

Monometallic supported gold catalysts in organic transformations: Ring making and ring breaking,

*Catalysts* **2**, 101-120 (2012).

IF: –

IH: 1

Közlemények folyóiratban, összesen: **6**

A dolgozathoz kapcsolódóan: **5**

Halmazott impakt faktor, összesen: **7.779**

A dolgozathoz kapcsolódóan: **7.779**

Független hivatkozások, összesen: **6**

A dolgozathoz kapcsolódóan: **5**