

54. Komplexkémiái Kollokvium

**Az MKE Komplexkémiái Szakcsoportjának és
az MTA Koordinációs Kémiai Munkabizottságának
a rendezvénye**

2021. május 26-27., on-line

Részletes program

MÁJUS 26. (SZERDA)

Elnök: Buglyó Péter (DE)

- 8.50 – 9.00 Megnyitó: Várnagy Katalin (DE), a Komplexkémiai Szakcsoport elnöke.
- 9.00 – 9.20 **E1** Forgács Attila, Balogh Zoltán, Len Adél, Dudás Zoltán, Lihi Norbert, May Nóra, András Melinda, Fábán István, Kalmár József (DE): **Szabad és aerogélen immobilizált Cu(II)-ciklén komplex katalizátorok hatásmechanizmusának vizsgálata oxidációs reakción keresztül**
- 9.20 – 9.40 **E2** Orosz Krisztina, Marozsán Natália, Joó Ferenc, Udvardy Antal, Kathó Ágnes, Papp Gábor, Horváth Henrietta (DE): **Új Ir(I)-N-heterociklusos karbén komplexek előállítása, jellemzése és katalitikus alkalmazásai**
- 9.40 – 10.00 **E3** Orosz Krisztina, Joó Ferenc, Udvardy Antal, Papp Gábor, Kathó Ágnes, Marozsán Natália, Horváth Henrietta (DE): **Folyékony szerves vegyületek, mint hidrogéntároló rendszerek: Ir(I)-NHC komplexek aktivitása hidrogénezési-dehidrogénezési reakciókban**
- 10.00 – 10.20 **E4** Czégény Csilla Enikő, Fekete Marianna, Udvardy Antal, Horváth Henrietta, Papp Gábor, Kathó Ágnes, Joó Ferenc (DE): **Allil-alkoholok redox izomerizációja új vízoldható ródium(I)-NHC és NHC/tercier foszfin vegyes komplexekkel**
- 10.20 – 10.40 **E5** Bodnár Nikolett, Kállay Csilla, Nagy Lajos (DE): **A fémion-peptid közötti kölcsönhatást gyengítő kismolekulák hatása a peptidok fémion-katalizált oxidációjára**

10.40 – 11.05 *Szünet*

Elnök: Kállay Csilla (DE)

- 11.05 – 11.25 **E6** Bonczidai-Kelemen Dóra, May Nóra Veronika, Fábán István, Lihi Norbert (DE): **NiSOD enzimmodellek katalitikus sajátságai**
- 11.25 – 11.55 **E7** Hajdu Bálint, Kis Máté Levente, Ivayla Pantcheva, Gyurcsik Béla (SzTE): **Monensin A – egy ionofór antibiotikum fémkomplexei kétértékű fémionokkal**
- 11.55 – 12.15 **E8** Hajdu Bálint, Gyurcsik Béla (SzTE): **Cinkujj fehérjék kölcsönhatása fémionokkal**
- 12.15 – 12.35 **E9** Böszörményi Éva, Kása Zsolt, Peintler Gábor, †Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **Egyensúlyok biner neodímium–glükonát és terner kalcium–neodímium–glükonát rendszerek vizes oldataiban**
- 12.35 – 12.55 **E10** Kása Zsolt, Buckó Ákos, Szabados Márton, Kutus Bence, Berkesi Ottó, Kónya Zoltán, Kukovecz Ákos, †Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **Kalcium, alumínium és heptaglükonát tartalmú terner csapadékok szerkezete és termikus tulajdonságai**

05.26. szerda

05.26. szerda

05.26. szerda

05.26. szerda

05.26. szerda

05.26. szerda

05.26. szerda

54. Komplexkémiai Kollokvium

12.55 – 14.00 *Ebédszünet*

Koordinációs Kémiai Munkabizottság ülése

Elnök: Elnök: Enyedy Éva Anna (SzTE)

14.00 – 14.10 Megnyitó: Kaizer József (PE), a Munkabizottság leköszönő elnöke és Enyedy Éva Anna (SzTE), a Munkabizottság újonnan megválasztott elnöke.

14.10 – 14.30 **E11** Tatsiana V. Petrasheuskaya, Kiss Márton A., Dömötör Orsolya, Spengler Gabriella, Debora Wernitznig, Bernhard K. Keppler, May Nóra Veronika, Frank Éva, Enyedy Éva Anna (SzTE): **Rákellenes tioszemikarbazon – ősztron hibridvegyületek és rézkomplexeik**

14.30 – 14.50 **E12** Kiss Tamás, Jakusch Tamás (SzTE): **„Egyensúlytalanságok” az egyensúlyi kémiában**

14.50 – 15.15 **E13** Bányai István (DE): **Kinetika a koordinációs kémiában, az egyensúlytól nagyon távol és nagyon közel**

15.15 – 15.40 **E14** Jakab Tóth Éva (CNRS): **Metal complexes for amyloid detection**

15.40 – 16.00 **E15** Szilágyi Balázs, Váradi Balázs, Purgel Mihály, Tircsó Gyula (DE): **Több ligandumot egy csapásra: ligandumkönyvtárak előállítása diagnosztikai és terápiás fémionok komplexálása céljával**

16.00 – 16.10 Elnöki zárszó

16.10 – 16.35 *Szünet*

Elnök: Jancsó Attila (SzTE)

16.35 – 16.55 **E16** Csupász Tíbor, Purgel Mihály, Tóth Imre (DE): **Hol keressük oldatban a Bi(III) iont?**

16.55 – 17.15 **E17** Szücs Dániel, Fekete Anikó, Szikra Dezső, Tóth Imre (DE): **^{205/206}Bizmut-polioxopalladát komplexek hordozómentes radioaktív szintézise**

17.15 – 17.35 **E18** Pivarsik Tamás, Dömötör Orsolya, Mészáros János P., May Nóra Veronika, Csuvik Oszkár, Fülöp Ferenc, Szatmári István, Spengler Gabriella, Enyedy Éva Anna (SzTE): **Rákellenes 8-hidroxi-kinolin-aminosav hibridek és félszendvics Ru és Rh komplexeik előállítása és vizsgálata**

17.35 – 17.55 **E19** Kovács Nóra Ildikó, Bíró Linda, Buglyó Péter (DE): **Egy ambidentát piridinon-származék oldatbeli kölcsönhatása a fémorganikus $[(\eta^6\text{-p-cym})\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ és $[(\eta^5\text{-Cp}^*)\text{Rh}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ kationokkal**

MÁJUS 27. (CSÜTÖRTÖK)

Elnök: Ósz Katalin (PTE)

- 9.00-9.20 **E20** Garda Zoltán, Gwladys Nizou, Molnár Enikő, Madarasi Enikő, Verner Bettina, Kálmán Ferenc Krisztián, Maryline Beyler, Raphaël Tripier, Tircsó Gyula (DE): **Egyszeresen helyettesített piklén származék ligandumok és Mn(II)-komplexeik kémiai jellemzése: egyensúly, kinetika, relaxometria**
- 9.20-9.40 **E21** Lakatos Gergő, Csupász Tibor, Kálmán Ferenc Krisztián, Madarasi Enikő, Tóth-Molnár Enikő, Tircsó Gyula (DE): **Legózás molekuláris szinten: Mn(II)-komplexálására alkalmas ligandumok tervezése és előállítása koordinációs kémiai módszerekkel**
- 9.40 – 10.00 **E22** Váradi Balázs, Garda Zoltán, Madarasi Enikő, Brezovcsik Károly, Szűcs Zoltán, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **A Mn(II)-ion komplexálására alkalmas bifunkciós ligandumok előállítása és összehasonlító jellemzése**
- 10.00 – 10.20 **E23** Timári István, Bagi Péter, Keglevich György, E. Kövér Katalin (DE): **Nagy felbontású NMR módszerek alkalmazása foszfortartalmú fémkomplexek szerkezetvizsgálatára**
- 10.20 – 10.45 **E24** Szalontai Gábor (PE): **Időben változó méretű molekulák diffúziója (A mátrix-segített DOSY kísérlet legújabb mutációi)**

10.45 – 11.05 *Szünet*

Elnök: Papp Gábor (DE)

- 11.05 – 11.25 **E25** Marianna Tosato, Marco Dalla Tiezza, Nóra Veronika May, Abdirisak Ahmed Isse, Sonia Nardella, Laura Orian, Marco Verona, Christian Vaccarin, André Alker, Helmut Mäcke, Paolo Pastore, Valerio Di Marco (TTK): **Szulfid oldalláncot tartalmazó makrociklusok, mint lehetséges ^{64/67}Cu radioterápiás komplexképzők koordinációs kémiai vizsgálata**
- 11.25 – 11.55 **E26** Grenács Ágnes, Sándor Balázs, Pálincás Dóra Csilla, Várnagy Katalin (DE): **Szerin oldallánc hatása peptidek 4N nikkel(II)-komplexeire**
- 11.55 – 12.15 **E27** Nagy Sándor, Ozsváth András, Bényei Attila, Farkas Etelka, Buglyó Péter (DE): **Hidroxipiridinon származékok komplexképző sajátosságainak vizsgálata**
- 12.15 – 12.35 **E28** Azza A. Hassoon, Attila Szorcsik, Ibolya Papp, Livia Fülöp, Zoltán Kele, Tamás Gajda (SzTE): **Interaction of half-sandwich (Cp*)Rh(III) cation with some biologically relevant oligopeptides**
- 12.35 – 12.55 **E29** Kapus István, Csupász Tibor, Tircsó Gyula (DE): **Makrociklusban oxigénatomot tartalmazó komplexképző előállítása és Mn(II)-komplexének vizsgálata angiográfias képalkotáshoz**

05.27. csütörtök

05.27. csütörtök

05.27. csütörtök

05.27. csütörtök

05.27. csütörtök

05.27. csütörtök

05.27. csütörtök

12.55 – 14.00 *Ebédzünet*

Elnök: Sipos Pál (SzTE)

14.00 – 14.20 Horváth Dávid, Baranyai Zsolt, Tircsó Gyula, Tóth Imre (DE): **Bi(III)-komplexek kémiai jellemzése, orvosi diagnosztikai és terápiás célú felhasználásukhoz**
E30

14.20 – 14.40 Csupász Tibor, Lihi Norbert, Fekete Zsuzsa, Nagy Antónia, Botár Richárd, Forgács Viktória, Szikra Dezső, Tircsó Gyula, Kálmán Ferenc Krisztián (DE): **Új típusú Cu(II)-komplexek radioteranosztikai alkalmazásokhoz**
E31

14.40 – 15.00 Nagy Antónia, Csupász Tibor, Kálmán Ferenc Krisztián, Tircsó Gyula (DE): **Egy O-piklén származék ligandum Mn(II)-komplexének koordinációs kémiai vizsgálata**
E32

15.00 – 15.20 Sajtos Gergő Zoltán, Váradi Balázs, Madarasi Enikő, Molnár Enikő, Kálmán Ferenc Krisztián, Tircsó Gyula (DE): **Merevgerincű pikolinát-csoportot tartalmazó Mn(II)-alapú MRI kontrasztanyag-jelölt előállítás és koordinációs kémiai jellemzése**
E33

15.20 – 15.40 Madarasi Enikő, Zubor András, Kálmán Ferenc Krisztián, Molnár Enikő, Trencsényi György, Kiss János, Veres Gergő, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **Egy Mn(II)-alapú pH-szenzitív kontrasztanyag-jelölt fizikokémiai paramétereinek a finombeállítása ligandumtervezéssel**
E34

15:40 – 16.05 *Szünet*

Elnök: Szigyártó Imola Csilla (TTK)

16.05 – 16.25 Kovács Henrietta, Orosz Krisztina, Papp Gábor, Joó Ferenc, Kathó Ágnes, Horváth Henrietta (DE): **Ir(I)-NHC-foszfin komplex rögzítése és alkalmazása hidrogénezési reakciókban batch és áramlásos körülmények között**
E35

16.25 – 16.45 Szolnoki Csenge Tamara, Marczali Orsolya, Kathó Ágnes, Horváth Henrietta, Joó Ferenc, Papp Gábor, Udvardy Antal (DE): **A *transz,mer*-[RuCl₂(OH₂)(PTA)₃] katalitikus tulajdonságai vizes közegben (PTA=1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán)**
E36

16.45 – 17.05 Szabados Márton, Szabó Vivien, †Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **Alumínium-hidroxid alapú réteges kettős hidroxidok előállítása alkoholos szolvatáció útján**
E37

17.05 – 17.25 Ziegenheim Szilveszter, Sztégura Alex, †Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **EDTA analógok mint a gipsz kristályosodásának inhibitorai**
E38

17.25 – 17.45 Tóth Annamária, Csomós Attila, Kontra Bence, Kovács Ervin, Galbács Gábor, Mucsi Zoltán, Jancsó Attila (SzTE): **Ca(II)-érzékelőkben potenciálisan alkalmazható módosított BAPTA származékok Ca²⁺- és Mg²⁺-kötő sajátságai**
E39

Előadás-összefoglalók

Szabad és aerogélen immobilizált Cu(II)-ciklén komplex katalizátorok hatásmechanizmusának vizsgálata oxidációs reakción keresztül

*Forgács Attila^{a,b}, Balogh Zoltán^{a,c}, Len Adél^c, Dudás Zoltán^c, Lihi Norbert^{a,b}, May Nóra^d
Andrási Melinda^a, Fábíán István^{a,b}, Kalmár József^{a,b}*

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék,

^b MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport,

^c Energiatudományi Kutatóközpont, Neutronspektroszkópiai Laboratórium

^d ELKH Természettudományi Kutatóközpont Kémiai Krisztallográfia Kutató Laboratórium

e-mail: forgacs.attila@science.unideb.hu

A települési és ipari szennyvizek biológiailag nem lebomló, toxikus szervesanyag tartalmának ártalmatlanítására nagyhatékonyságú oxidációs folyamatokat (AOP) fejlesztenek.[1] A fenolt kisebb szénatomszámú karbonsavakká oxidálhatjuk Cu(II) tartalmú katalizátor jelenlétében hidrogén-peroxiddal.[2] Az oxidációs folyamat végén azonban a katalizátort el kell távolítani a rendszerből, ezért célszerű a katalizátort szilárd hordozóra rögzíteni.

Kutatásunk során Cu(II)-ciklén komplexszel funkcionizált szilika aerogél, valamint szabad Cu(II)-ciklén komplex mint katalizátorok jelenlétében vizsgáltuk a fenol hidrogén-peroxidos oxidációját.[3] Az előállított aerogél anyagszerkezeti tulajdonságainak és komplex kötőmódjának megállapítása után a klasszikus reakciókinetikai eredményeinkből felállítottuk a katalitikus reakciók kinetika modelljét. A köztitermékeket kapilláris elektroforézis (MEKC) technikával azonosítottuk. Megállapítottuk, hogy a szabad és az immobilizált komplex katalizátor szerkezete megegyezik, hatásmechanizmusa azonban mégis eltér. Magyarázat lehet a nyílt mezopórusos aerogélben fellépő kinetikai jelenség, a zárttér-hatás.

[1] R. Andreozzi, et.al. *Catalysis Today* **1999** (53), 51-59.

[2] N. S. Inchaurredo, et.al. *Chemical Engineering Journal*, **2012** (198-199), 426-434,

[3] H.F. Bereczki, L. Daróczy, I. Fábíán, I. Lázár. *Microporous and Mesoporous Materials* **2016**; 234:392-400.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NFKI Hivatal (OTKA FK_17-124571) valamint az ÚNKP-20-2-I kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

Új Ir(I)-*N*-heterociklusos karbén komplexek előállítása, jellemzése és katalitikus alkalmazásai

Orosz Krisztina^{a,b}, Marozsán Natália^a, Joó Ferenc^{a,c}, Udvardy Antal^a, Kathó Ágnes^a,
Papp Gábor^a, Horváth Henrietta^c

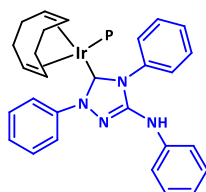
^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

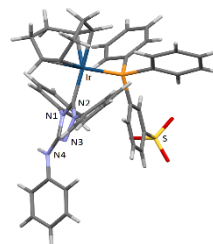
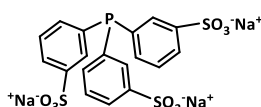
^c MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen

e-mail: marozsan.natalia@science.unideb.hu

Napjainkban a zöld kémia alapelveit figyelembe véve a szerves szintézisek során egyre gyakrabban próbálnak meg vizet alkalmazni az egészségre káros oldószerek helyett.[1] Kutatócsoportunk érdeklődése a vízdoldható katalizátorok előállítására és felhasználásukra évtizedes múltra tekint vissza.[2] Munkánk során előállítottunk számos új, az irodalomban még nem ismert Ir(I)-(NHC)-foszfin vegyes ligandumú komplexet (NHC = *N*-heterociklusos karbén, foszfin = PPh₃, *mtp*pms, *mtp*ppts), melyek szerkezetét széleskörűen jellemeztük. A vízdoldható Na₂[Ir(η⁴-cod)(Nitron)(*mtp*ppts)] összetételű katalizátort sikeresen alkalmaztuk alkinek és vízdoldható karbonsavak katalitikus hidrogénezésében vizes-szerves kétfázisú és vizes reakciókban.



P:



Na₂[Ir(η⁴-cod)(Nitron)(*mtp*ppts)] komplex szerkezeti képlete és röntgenszerkezete

[1] F. Joó: *Aqueous Organometallic Catalysis (Catalysis by Metal Complexes)* in: Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, **2001**.

[2] H. Horváth, Á. Kathó, A. Udvardy, G. Papp, D. Szikszai, F. Joó: *Organometallics*, **2014**, (33), 6330.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-FK128333). A tanulmány alapjául szolgáló kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium által meghirdetett Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-04) támogatta.

Folyékony szerves vegyületek, mint hidrogéntároló rendszerek: Ir(I)-NHC komplexek aktivitása hidrogénezési-dehidrogénezési reakciókban

*Orosz Krisztina^{a,b}, Joó Ferenc^{a,c}, Udvardy Antal^a, Papp Gábor^a, Kathó Ágnes^a,
Marozsán Natália^a, Horváth Henrietta^c*

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^c MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen

e-mail: orosz.krisztina@science.unideb.hu

A megújuló energiaforrások által termelt energia biztonságos és reverzibilis tárolása mind az alap mind pedig az alkalmazott kutatások középpontjában állnak. Ennek egyik megvalósulási módja lehet a hidrogénben tárolt energia. A molekuláris hidrogén biztonságos és reverzibilis kémiai tárolására sokféle javaslat, elképzelés létezik. Például a folyékony szerves hidrogéntároló rendszerek (melyek hidrogénezési, dehidrogénezési reakciókon alapulnak) alkalmazása univerzális megoldás lehet a problémára.[1-2]

Munkánk során szintetizáltunk és alkalmaztunk számos új Ir(I)-NHC és Ir(I)-NHC-foszfin katalizátort (NHC = *N*-heterociklusos karbén, foszfin = PPh₃, mtp₃ms, mtp₃pts) ketonok homogén katalitikus hidrogénezésében. Az előállított komplexek a ketonok hidrogénezésével képződött megfelelő szekunder alkoholok dehidrogénezését is aktívan katalizálták. Részletes vizsgálatokat végeztünk, hogyan hatnak a különböző fizikai és kémiai paraméterek az egyes részfolyamatokra.



[1] H. Horváth, Á. Kathó, A. Udvardy, G. Papp, D. Szikszai, F. Joó: *Organometallics*, **2014**, (33), 6330-6340.

[2] K. Orosz, G. Papp, Á. Kathó, F. Joó, H. Horváth: *Catalysts*, **2020**, (10) (1), 17.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-FK128333). A tanulmány alapjául szolgáló kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium által meghirdetett Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-04) támogatta.

Allil-alkoholok redox izomerizációja új vízdoldható ródium(I)-NHC és NHC/tercier foszfin vegyes komplexekkel

*Czégéni Csilla Enikő^a, Fekete Marianna^b, Udvardy Antal^b, Horváth Henrietta^a, Papp Gábor^b,
Kathó Ágnes^b, Joó Ferenc^{a, b}*

^a MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

^b Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

e-mail: nagy.csilla@science.unideb.hu

Az N-heterociklusos (NHC) karbének széleskörűen alkalmazott ligandumok a fémorganikus és szervetlen koordinációs kémiában. Az NHC karbének könnyen koordinálódnak a különböző átmentifémekhez és stabilis fém-NHC karbén komplexet eredményeznek.[1] Az új [RhCl(sSImes)(cod)] (sSImes = 1,3-bis(2,4,6-trimetil-3-nátrium-szulfonatofenil)imidazolin-2-ilidén) komplexet a nem vízdoldható ródium(I)-NHC komplexek esetén leírt irodalmi módszert követve állítottuk elő.[2] Az irodalomból már ismert [RhCl(cod)(bmim)] komplexből[3] (bmim = 1-butil-3-metil-imidazol-2-ilidén; cod = η^4 -ciklo-1,5-dién) új, vízdoldható vegyes NHC/tercier foszfin komplexeket állítottunk elő: [Rh(bmim)(cod)(pta)]BF₄ Na₂[Rh(bmim)(cod)(mtppts)] (pta = 1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán; mtppts-Na = triszulfonált-trifenil-foszfin nátrium-sója).

Ezek a komplexek aktív és szelektív katalizátorai különféle alk-1-én-3-olok redox izomerizációs reakciójának ketonokká vizes oldatokban, inert atmoszférában (hidrogén nélkül) is.[4]

[1] W. A. Herrmann, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2002**, *41*, 1290.

[2] A. Bittermann, D. Baskakov, W.A. Herrmann, *Organometallics* **2009**, *28*, 5107.

[3] K. H. Park, S. Y. Kim, S. U. Son, Y. K. Chung, *Eur. J. Org. Chem.*, **2003**, 4341.

[4] C. E. Czégéni, M. Fekete, E. Tóbiás, A. Udvardy, H. Horváth, G. Papp, F. Joó, *Catalysts*, **2020**, *10*, 1361.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz NKFI-FK128333. A tanulmány alapjául szolgáló kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium által meghirdetett Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-04) támogatta.

A fémion-peptid közötti kölcsönhatást gyengítő kismolekulák hatása a peptidek fémion-katalizált oxidációjára

Bodnár Nikolett^a, Kállay Csilla^a, Nagy Lajos^b

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

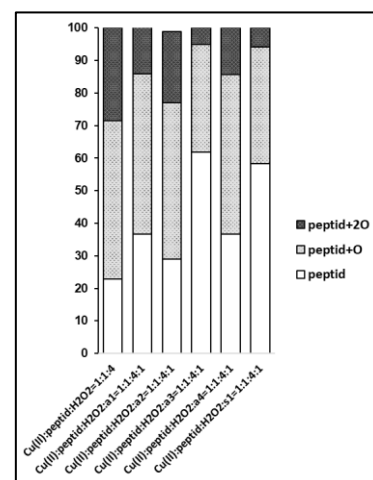
^b Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

e-mail: bodnar.nikolett@science.unideb.hu

Ma már általánosan elfogadott, hogy egyes fémionok fontos szerepet játszanak a neurodegeneratív elváltozások kifejlődésében és ezen betegségek lefolyásában is. Az idegrendszeri betegségek kialakulása a fehérjemolekulák konformációváltozásával és az azt követő aggregációjával van összefüggésben, ezekben a folyamatokban a fémionoknak is szerepe van. Az újabb tanulmányok azt mutatják, hogy a fémionok nemcsak a koordinációjuk révén, hanem a reaktív oxigén tartalmú részecskék képződésének elősegítése miatt is hozzájárulnak a neurodegeneratív betegségek kialakulásához.


Munkánk során prion protein fragmensek fémion-katalizált oxidációját tanulmányozzuk. Vizsgáljuk különböző védőmolekulák, a gyökfogóként ismert aszkorbinsav és a fémion és peptid közötti kölcsönhatást gyengítő kismolekulák (aróil-hidrazon és szalán-típusú ligandumok) hatását is. Tanulmányozzuk, hogy ezek a vegyületcsoportok kompetícióba lépnek-e a fémionokért, így módon védve a fehérjét a különböző betegség kialakulását okozó oxidációval szemben.

Eddig eredményeink azt mutatják, hogy a peptid mellett a vizsgált kismolekulák is részt vesznek a réz(II)ion koordinációjában, és az így képződő vegyesligandumú komplexek akadályozzák a peptid oxidációját.



1. ábra: Egy human prion protein oxidációja során keletkezett termékek százalékos eloszlása 60 perc elteltével különböző aróil-hidrazonokat (a1, a2, a3) és szalán típusú vegyületet (s1) tartalmazó rendszerek esetén.

Köszönetnyilvánítás: Munkánkat az OTKA (K 115480 és K 124983) támogatta.

„ AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA ÚNKP-21-5 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT”

NiSOD enzimmodellek katalitikus sajátosságai

Bonczidai-Kelemen Dóra^a, May Nóra V.^b, Fábíán István^{a,c}, Lihi Norbert^{a,c}

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen

^b Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

^c MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen

e-mail: lihi.norbert@science.unideb.hu

A nikkelt tartalmazó szuperoxid-dizmutáz enzim első kilenc aminosavból álló régiója a fémion megkötéséért és a dizmutálási reakcióért felelős szekvenciát. Az enzim érdekessége, hogy habár számos, oxidációra érzékeny aminosavat tartalmaz, a dizmutálási reakció fémion központú és a nikkell oxidációs állapota +2 és +3 között változik.

Az előadás keretein belül a NiSOD enzim aktív centrumát modellező peptidek nikkell-komplexeinek oldategyensúlyi-, spektroszkópiái- és SOD aktivitás vizsgálatát mutatjuk be, összehasonlítva a natív fragmens első kilenc aminosavegységből álló peptid nikkell-komplexével.[1-3]

- [1] N. Lihi, G. Csire, B. Szakács, N. V. May, K. Várnagy, I. Sóvágó, I. Fábíán, *Inorg. Chem.*, **2019**, 58(2) 1414-1424.
- [2] N. Lihi, D. Kelemen, N. V. May, I. Fábíán, *Inorg. Chem.*, **2020**, 59(7) 4772-4780.
- [3] D. Kelemen, N. V. May, M. Andrási, A. Gáspár, I. Fábíán, N. Lihi, **2020**, *Chem. Eur. J.*, 26(70) (2020) 16767-16773.

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönetet mondanak az NKFIH PD-128326 és K-124983 sz. pályázatainak. A munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-4-II kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának, továbbá a Kooperatív Doktori Program Doktori Hallgatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Monensin A – egy ionofór antibiotikum fémkomplexei kétértékű fémionokkal

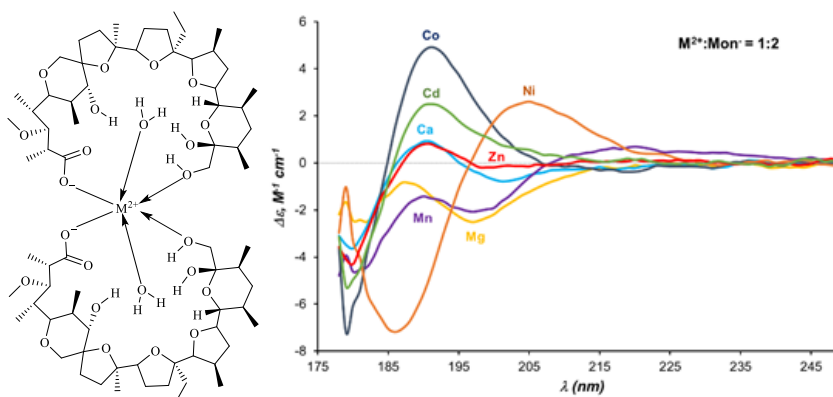
Hajdu Bálint^a, Kis Máté Levente^a, Ivayla Pantcheva^b, Gyurcsik Béla^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b “St. Kl. Ohridski” University of Sofia, Department of Analytical Chemistry, Bulgaria

e-mail: gyurcsik@chem.u-szeged.hu

A Monensin A ionofór sajátossága lehetővé teszi fémionok transzportját a sejtmembránon keresztül. Mivel a ligandum számos egy-, illetve kétértékű fémionnal stabilis komplexet képez, elképzelhető, hogy antibiotikus hatása a fémion-háztartás felborításán alapszik. A kétértékű fémionokkal eddig egykristály-szerkezetek alapján ML_2 összetételű semleges komplexeket sikerült azonosítani [1,2]. Ezek meglehetősen hasonló szerkezete, nem indokolja a jelentős eltéréseket a metanolos oldatokban mérhető cirkuláris dikroizmus spektrumok alakjában. Továbbá oldatfázisban sikerült stabilis $[ML]^+$ komplexek jelenlétét is kimutatnunk.[3]



Az UV és látható fény hullámhossz-tartományában mért cirkuláris dikroizmus spektrumok a Monensin A komplexek számos érdekességére hívják fel a figyelmet, melyekről bővebben az előadásban lesz szó.

- [1] Pantcheva, I.N., Zhorova, R., Mitewa, M., Simova, S., Mayer-Figge, H., Sheldrick, W.S., *BioMetals*, **2010**, 2, 59-70.
- [2] Pantcheva, I.N., Mitewa, M.Io., Sheldrick, W.S., Oppel, I. M., Zhorova, R., Dorkov, P., *Curr. Drug Discov. Technol.*, **2008**, 5, 154-161.
- [3] Pantcheva, I., Nedzhib, A., Antonov, L., Gyurcsik B., Dorkov, P., *Inorg. Chim. Acta*, **2020**, 505, 119481.

Köszönetnyilvánítás: A projektet támogatták: GINOP-2.3.2-15-2016-00038, NKFIH K_16/120130.

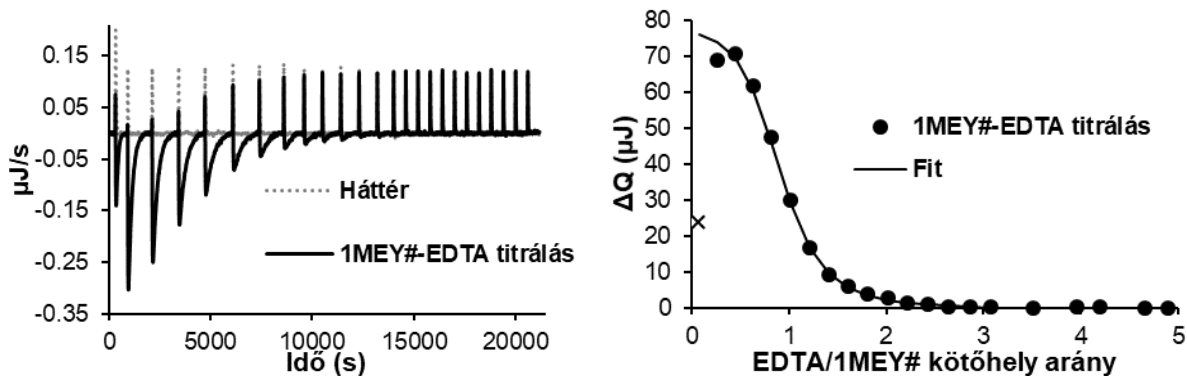
Cinkujj fehérjék kölcsönhatása fémionokkal

Hajdu Bálint^a, Gyurcsik Béla^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: balinth11@chem.u-szeged.hu

A moduláris felépítésű cinkujj fehérjék képesek felismerni különféle DNS-szekvenciákat. A természetben gének átíródását szabályozzák, de átalakíthatók specifikus DNS-módosító enzimekké is [1]. Korábbi munkánk során egy cinkujj fehérje Ni(II) ionokkal történő szelektív hidrolízisével potenciális mesterséges nukleáz állítottunk elő [2]. A fémion által indukált fehérje hasítás egy amino-terminális Cu(II)/Ni(II)-kötő – úgynevezett ATCUN – motívum képződését eredményezte, amely képes hasítani a DNS-t [3]. Mivel a cinkujj fehérjék csak Zn(II)-komplex formájában képesek felismerni a megcélzott DNS-szekvenciájukat, ezért elengedhetetlen – főleg egy potenciális nukleáz esetén – meghatározni a fehérje cinkkötésének erősségét. Ezen túlmenően figyelembe kell venni a kompetíciót a szervezetben megtalálható egyéb (toxikus) fémionokkal.



Optimalizált cirkuláris dikroizmus és izoterm titrálós kalorimetriás módszerek segítségével meghatároztuk egy három cinkujj doménből felépülő fehérje Zn(II)-stabilitását. Emellett a FluoZin-3 Zn(II)-szelektív fluorofór segítségével megkezdjük a kompetíciós vizsgálatokat Cu(II), Ag(I), Cd(II), Hg(II) és Co(II) ionokkal.

- [1] S. Durai, M. Mani, K. Kandavelou, J. Wu, M. H. Porteus, S. Chandrasegaran, *Nucleic Acids Res.*, **2005**, *33*, 5978-90.
- [2] A. Belczyk-Ciesielska, B. Csipak, B. Hajdu, A. Sparavier, M. N. Asaka, K. Nagata, B. Gyurcsik W. Bal, *Metallomics.*, **2018**, 1089–1098
- [3] C. Harford, B. Sarkar, *Acc. Chem. Res.*, **1997**, *30*, 123-130

Köszönetnyilvánítás: A projektet támogatták: GINOP-2.3.2-15-2016-00038, NKFIH K_16/120130.

Egyensúlyok biner neodímium–glükonát és terner kalcium–neodímium–glükonát rendszerek vizes oldataiban

Böszörményi Éva^{a,b}, Kása Zsolt^{a,b}, Peintler Gábor^{a,c}, †Pálinkó István^{b,d}, Sipos Pál^{a,b}

^a Szegedi Tudományegyetem, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

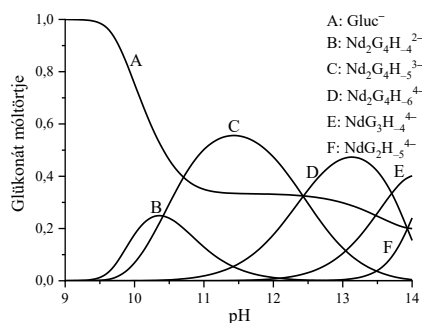
^b Szegedi Tudományegyetem, Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport

^c Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

^d Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

e-mail: boseva@chem.u-szeged.hu

Az aktinoida fémionok oldhatóságát befolyásoló tényezők megismerése a radioaktív hulladéktárolókban környezetvédelmi szempontból fontos kérdés [1], azonban kísérletileg nehezen megoldható. Ezért elfogadott az aktinoidákkal nagy kémiai hasonlóságot mutató lantanoida [2] fémionok használata a mérések során. Kutatásainkhoz modell fémionként a neodímiumot választottuk, és vizsgáltuk komplexképzésre való hajlamát a cementben számottevő mennyiségben jelen lévő glükonáttal.



1. ábra: Neodímium-glükonát rendszer eloszlási diagramja

Spektrofotometriás és potenciometriás adatok együttes illesztése alapján meghatároztuk a biner neodímium–glükonát rendszerben kialakuló komplexek összetételét és stabilitási szorzatát, majd több független módszerrel validáltuk a kapott eredményt. A következő, folyamatban lévő lépés egy, a terner kalcium–neodímium–glükonát rendszer leírására alkalmas modell felállítása.

[1] J.A. Schramke, E. F. U. Santillan, R. T. Peake, *Applied Geochem.*, **2020**, *116*, 104561.

[2] P. J. Panak, A. Geist, *Chem. Rev.*, **2013**, *113*, 1199–1236.

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönik a pénzügyi támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak (Grant NKFIH 124 265).

Kalcium, alumínium és heptaglukonát tartalmú terner csapadékok szerkezete és termikus tulajdonságai

*Kása Zsolt^a, Buckó Ákos^a, Szabados Márton^b, Kutus Bence^c, Berkesi Ottó^d, Kónya Zoltán^e,
Kukovecz Ákos^e, †Pálinkó István^b, Sipos Pál^a*

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

^c Max Planck Polimerkutató Intézet, Molekulaspektroszkópiái Tanszék

^d Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

^e Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

e-mail: kasa.zsolt@chem.u-szeged.hu

Jelen munkában kalcium, alumínium és heptaglukonát tartalmú, a Bayer folyamat során potenciálisan képződő heteropolinukleáris csapadékok szerkezetét és hőstabilitását vizsgáltuk. A csapadékokat korábbi munkáink során már részletesen leírt alumínium-heptaglukonát [1] oldathoz adagolt kalcium-klorid oldattal állítottuk elő.

A röntgendiffrakciós mérések alapján minden csapadék amorf, melyet a SEM mérések tovább erősítettek. Az EDX vizsgálat rávilágított arra, hogy egy mintán belül fémszegregáció nem figyelhető meg, azaz a kalcium és alumínium egyenletesen van jelen a heptaglukonát mátrixban. IR és Raman mérésekkel feltártuk a fémionok központi és szimmetrikus elrendezését, míg termogravimetriás mérésekkel bizonyítottuk, hogy a képződött terner csapadékok a biner heptaglukonát rendszerekhez képest megnövekedett hőstabilitással rendelkeznek.

ICP-OES és UV-Vis mérésekkel meghatároztuk a csapadékok kalcium, alumínium és heptaglukonát tartalmát, majd az eredményekből három lehetséges terner kalcium-alumínium-heptaglukonát komplex só összetételre tettünk javaslatot: $\text{CaAlHpgl}(\text{OH})_4^0$, $\text{Ca}_2\text{AlHpgl}_2(\text{OH})_5^0$ és $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{Hpgl}_3(\text{OH})^0$. Jelen eredmények segíthetnek leírni az oldatfázisban képződő heteropolinukleáris kalcium, alumínium tartalmú komplexek leírásában.

[1] Buckó, Á.; Kutus, B.; Peintler, G.; Kele, Z.; Pálinkó, I.; Sipos, P. *J. Mol. Liq.* **2020**, 314, 113645

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönik a pénzügyi támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak (Grant NKFIH 124 265). Kása Zsolt köszönetet mond az NTP-NFTÖ pályázatának az anyagi támogatásért (NTP-NFTÖ-20-B-0029).

Rákellenes tioszemikarbazon – ősztron hibridvegyületek és rézkomplexeik

Tatsiana V. Petrasheuskaya^a, Kiss Márton A.^b, Dömötör Orsolya^a, Spengler Gabriella^c,
Debra Wernitznig^d, Bernhard K. Keppler^d, May Nóra V.^e, Frank Éva^b, Enyedy Éva Anna^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA-SZTE Lendület
Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport

^b Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

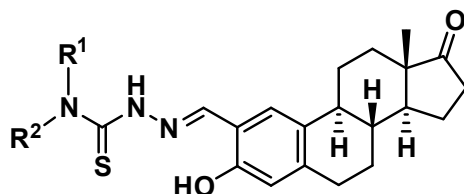
^c Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Mikrobiológiai Intézet

^d Bécsi Egyetem, Szervetlen Kémiai Intézet, Ausztria

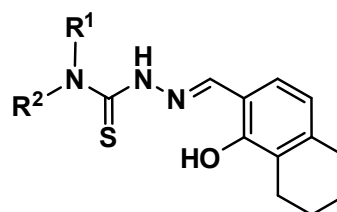
^e Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ, Budapest

e-mail: enyedy@chem.u-szeged.hu

A tioszemikarbazonok rákellenes tulajdonsága régóta ismert, három képviselőjük (*kódnév: 3-AP, DpC, COTI-2*) már klinikai vizsgálatba jutott. Biológiai hatásuk endogén fémionokkal, elsősorban vassal és rézzel való komplexképződésükhöz kötődik. A tioszemikarbazonok kiemelkedő stabilitású komplexeket képeznek a réz(II)ionokkal [1], és a komplexek citotoxicitása gyakran nagyobb a ligandumhoz képest. Különböző farmakofór egységek kombinálásával biológiailag még hatékonyabb vegyületeket kaphatunk. Jelen munkában három tioszemikarbazon – ősztron hibridvegyület (*estrone-TSC, Me-estrone-TSC, Me₂-estrone-TSC*) rézkomplexének előállítását, oldatkémiai, redoxi és biológiai (antitumor és antibakteriális) tulajdonságainak jellemzését mutatjuk be. Vizsgálatainkba vízben jobb oldhatóságú analóg biciklusos (*thn*) vegyületeket is bevontunk szerkezeti modellként.



estrone-TSC ($R^1 = H, R^2 = H$)
Me-estrone-TSC ($R^1 = H, R^2 = Me$)
Me₂-estrone-TSC ($R^1 = R^2 = Me$)



thn-TSC ($R^1 = H, R^2 = H$)
Me-thn-TSC ($R^1 = H, R^2 = Me$)
Me₂-thn-TSC ($R^1 = R^2 = Me$)

[1] É.A. Enyedy, N.V. May, V.F.S. Pape, P. Heffeter, G. Szakács, B.K. Keppler, C.R. Kowol, *Dalton Trans.*, **2020**, *49*, 16887.

Köszönetnyilvánítás: OTKA FK 124240, GINOP-2.3.2-15-2016-00038.

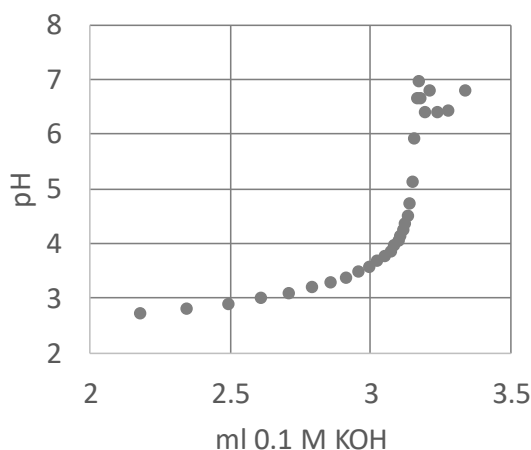
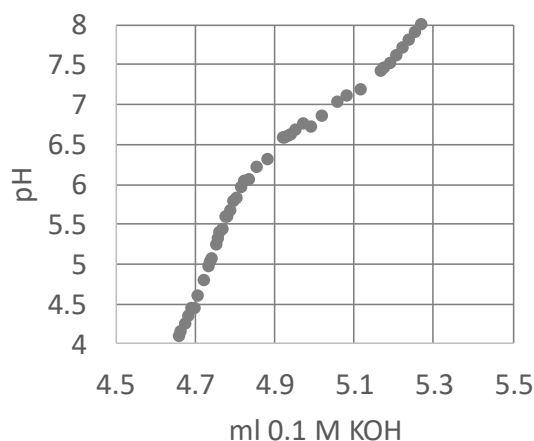
„Egyensúlytalanságok” az egyensúlyi kémiában

Kiss Tamás, Jakusch Tamás

Szegei Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

e-mail: jakusch@chem.u-szeged.hu

Az egyensúlyi, alapvetően pH-metriás titrálások „rémei” a lassú, néhány percen belül le nem játszódó komplexképző folyamatok, illetve az olyan nemkívánt mellékreakciók, mint például csapékképződés, redoxreakció vagy a ligandum hidrolízise. Ezek kiküszöbölésére/leírására mutatnék be sikeres (és kevésbé sikeres) példákat vanádium(IV/V)¹⁻³, alumínium(III)⁴, ruténium(III)⁵ illetve réz(I) fémionokkal történt mérésekkel kapcsolatban.

*Cu(I)OH csapadék glicin jelenlétében**Cu(I)-cisztein komplex csapadék oldódása*

Röviden áttekinténém a lúgmérőoldatok karbonáttartalmának meghatározásával kapcsolatos tapasztalatokat, illetve a titrálás vezérlésének problematikáját is.

- [1] Crans, DC ; Yang, LQ ; Jakusch, T ; Kiss, T, *Inorg. Chem.*, **2000**, 39, 4409.
 [2] Kiss, T ; Jakusch, T ; Pessoa, JC ; Tomaz, I, *Coord. Chem. Rev.* **2003**, 237, 123.
 [3] Jakusch, Tamas ; Kiss, Tamas, *Coord. Chem. Rev.* **2017**, , 118.
 [4] Lakatos, A ; Bányai, I ; Bertani, R ; Decock, P ; Kiss, T, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2001** 461.
 [5] Tamás, Jakusch ; Tamás, Kiss, *Z. Anorg. Allgem. Chem.* **2013**, 639, 1640.

Kinetika a koordinációs kémiában, az egyensúlytól nagyon távol és nagyon közel

Bányai István

Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémiai Tanszék
e-mail: banyai.istvan@science.unideb.hu

A koordinációs kémia talán legnagyobb hozadéka a kémia tudományában az oldategyensúlyi rendszerek nagyon gondos leírása, és ami ezzel együttjárt az egyensúlyi szemlélet kialakítása. Az, hogy az egyensúly beáll-e az nem kérdés, a kérdés az, hogy mikor, és hogyan. Erről a fémkomplexek szubsztitúciós reakcióinak „hagyományos” kinetikai vizsgálatait a legfontosabb források, hiszen a komplexképződés is valójában egy ligandum szubsztitúciós folyamat. Az ábrán egy $\text{Ln}(\text{edta})^-$ és a $\text{H}_x\text{dtpa}^{5-x}$ ligandumcsere reakciójának vázlatát és primer adatait láthatjuk a múlt század nyolcvanas éveiből. [1]

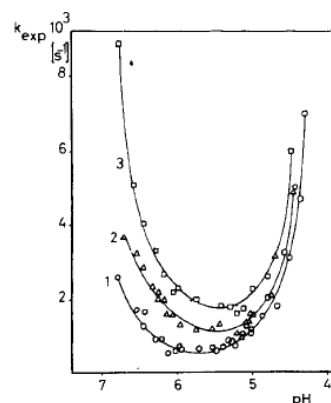
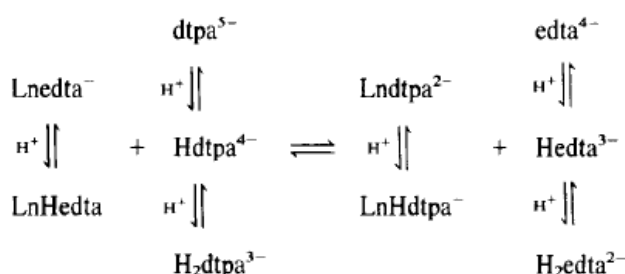


Fig. 1. Dependence of k_{exp} on pH at dtpa concentrations of (1) 9×10^{-4} M, (2) 2.3×10^{-3} M, (3) 4.4×10^{-3} M; $[\text{T}(\text{edta})]_0 = 3 \times 10^{-4}$ M.

A mágneses magrezonancia (NMR) relaxációs folyamatainak sebessége, sok esetben megegyezik a komplexegyensúlyok dinamikájával, így a módszer az egyensúlyi dinamika egyik meghatározó eszköze ezek vizsgálatában. [2] A módszer a komplex egyensúlyok lassú beállása esetén részletes információt ad a folyamatok lefolyásáról. [3] Az előadó valamikor tevékeny közreműködője volt mind a Munkabizottságnak, mind a Kollokviumnak. A visszatérés oka tisztelgés három, *tanárom, kollégám és barátom* előtt és a köszönet.

[1] E. Brücher, I. Bányai *J. Inorg. Nucl. Chem.*, **1980**, 42, 749-756.

[2] I. Bányai, J. Glaser, I. Tóth *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2001**, 7, 1709-1717

[3] A. Lakatos, I. Bányai, P. Decock, T. Kiss *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2001**, 7, 461-469

Köszönetnyilvánítás: NKFIH, K 131989 pályázatnak az anyagi forrásokért

Metal complexes for amyloid detection

Jakab Toth Eva

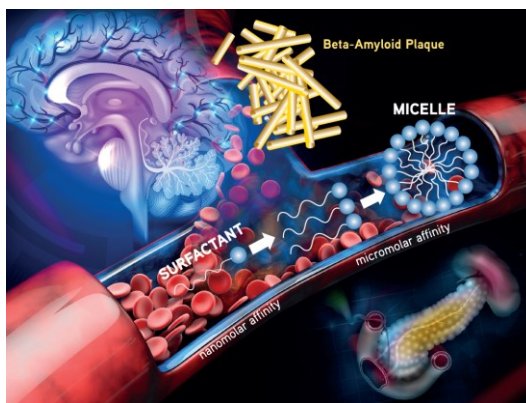
Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS, Orléans, France

e-mail: eva.jakabtoth@cns-orleans.fr

Metal complexes specifically recognizing amyloid peptides can be useful for diagnostic or therapeutic purposes in amyloid-related pathologies. For instance, complexes of lanthanides are potential MRI or nuclear imaging agents to visualize amyloid plaques. The interaction of metal complexes can also modify amyloid formation, oxidative stress, and toxicity, enabling to derive therapeutic strategies.

Most amyloid-binding metal chelates are amphiphilic, composed of a hydrophilic metal-coordinating unit and a hydrophobic amyloid-targeting moiety. Depending on the concentration and the medium, they form micelle-like aggregates, in which the peptide-recognition moiety can be more or less shielded, thereby impacting peptide interaction. Despite the abundant literature on amyloid-binding metal chelates, this aspect has not been so far addressed. We have shown that micellar aggregation of amphiphilic Gd³⁺ complexes drastically influences their binding affinity to β amyloid or amylin, implicated in Alzheimer's disease and in diabetes, respectively [1].

Today, increasing evidence suggests an interplay between Alzheimer's disease and diabetes, where cross-seeding between β amyloid or amylin seems to be a key step. In this context, selective detection of β amyloid or amylin can be particularly interesting. Some preliminary efforts in this direction will be presented.



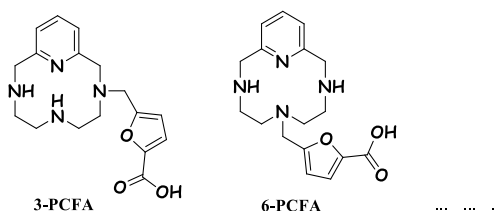
- [1]. S. Majdoub, Z. Garda, A. C. Oliveira, I. Relich, A. Pallier, S. Lacerda, C. Hureau, C. F.G.C. Geraldes, J.-F. Morfin and É. Tóth, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 2009 – 2020.

Több ligandumot egy csapásra: ligandumkönyvtárak előállítása diagnosztikai és terápiás fémionok komplexálása céljával

Szilágyi Balázs^a, Váradi Balázs^a, Purgel Mihály^a, Tircsó Gyula^a

^a Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémiai Tanszék
e-mail: gyula.tircso@science.unideb.hu

Ritka(föld)fém Kutatócsoport a Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék egyik legidősebb és a Fizikai Kémiai Tanszék legfiatalabb kutatócsoportja. A kutatócsoport kutatási profilját az alkalmazott koordinációs kémia „alakította” több évtizeden keresztül Dr. Brücher Ernő, később Dr. Tóth Imre professzorok vezetésével. A Mágneses Rezonanciás Képpalkotás (MRI) kontrasztanyagainak az 1980-as évek derekán történt bevezetését követően a ritkaföldfém(III)-komplexek vizsgálata központi/meghatározó szerephez jutott. A részletes egyensúlyi, kinetikai (oldószercseré, képződés és disszociáció), majd szerkezeti vizsgálatokat követően immáron a ligandumok tervezését és előállítását is házon belül végezzük. A laboratóriumunkban, ill. a tanszéken/intézetben elérhető analitikai és elválasztástechnikai infrastruktúra elérhető közelségbe hozza a ligandumkönyvtárak szimultán előállítását, a vegyületek elválasztását, és a komplexeik részletes (alkalmazás-centrikus) jellemzését, amely segítségével úgy tűnik sikerül „közelebb hozni” az átmenetifém-, a ritkaföldfém(III)ionok, stb. koordinációs kémiáját. Az előadásom során piridin-2-karboxilát- (pikolinát-, PA) és furán-5-karboxilát-csoportokat (furinát-, FA) tartalmazó ligandumok (pl. 3-PCFA, 6-PCFA stb. kelátorok, 1. ábra) előállításán keresztül tervezem bemutatni, a szokványos megközelítés (egy adott ligandum előállítására „megkomponált” szintézis séma), ill. a szimultán szintézisek előnyeit, hátrányait, ill. határait.



1. ábra. A 3-PCFA és a 6-PCFA komplexképzők szerkezeti képlete.

Köszönetnyilvánítás: Az előadásommal **Dr. Brücher Ernő** és **Dr. Tóth Imre** kutatók előtt tisztelgek, akinek ezúton is szeretnék köszönetet mondani a több, mint két évtizede tartó barátságukért, a sok-sok hasznos tanácsaikért, útmutatásaikért, a kellemes/baráti légkör és nem utolsósorban az anyagi háttér megteremtésért. A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 és 134694 sz. pályázatai támogatták.

Hol keressük oldatban a Bi(III) iont?

Csupász Tibor^{a,b}, Purgel Mihály^a, Tóth Imre^a

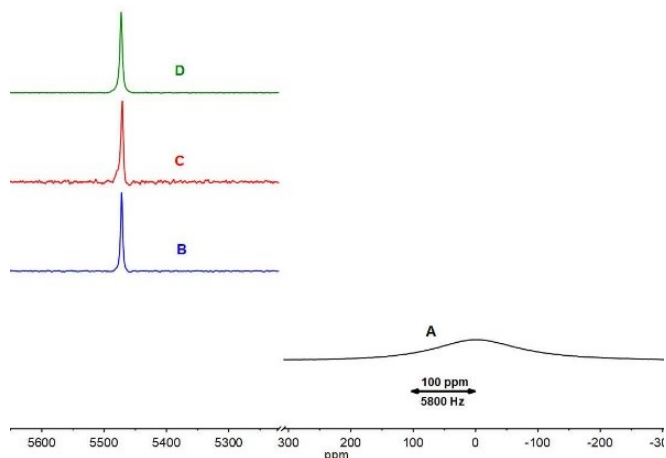
^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

^b Debreceni Egyetem, Kémia Tudományok Doktori Iskola

e-mail: imre.toth@science.unideb.hu

A ²⁰⁹Bi-NMR spektroszkópia a mag 100%-os előfordulása és kiváló érzékenysége ellenére sem játszik fontos szerepet oldatfázisban. Az $I = 9/2$ spin, valamint a kvadrupólus relaxáció miatt csak nagyon szimmetrikus környezetben van esély a jel detektálására. Nem véletlen, hogy mindezidáig csak a $[\text{Bi(V)F}_6]^-$ -anion és a $\text{Bi(III)}_{\text{aq}}$ kation NMR spektruma volt ismert oldatban.

Brémai kollégáink előállítottak egy sor Bi(III)-polioxopalladátot (BiPOP). Ezek teljesen szimmetrikus köbös $\{\text{BiO}_8\}$ vagy nem teljesen szimmetrikus pentagonális piramisos $\{\text{BiO}_{10}\}$ szerkezeti motívumot tartalmaznak attól függően, hogy a „capping” csoportban milyen az X-O kötéstávolság. Az előbbieket „karcsú” jeleket adtak, igaz kb. +5500 ppm távolságra a sokkal szélesebb Bi(III)_{aq} jeltől (1. ábra), utóbbiakat nem tudtuk detektálni.



1. ábra 57.47 MHz ²⁰⁹Bi NMR spektrumok: (A) telített $\text{Bi(NO}_3)_3$ cc. HNO_3 -ban (750 mM), (B) $\text{Na-BiPd}_{12}\text{AsL}$, (C) $\text{Na-BiPd}_{12}\text{AsL}_N$ és (D) $\text{Na-BiPd}_{12}\text{AsL}_C$ (25 mM D_2O -ban; 16k scan, kivéve A, ahol 532 scan, azonos felvételi paraméterek, LB=100 Hz simítás).

cc. HClO_4 -ban nem sikerült megtalálnunk a $\text{Bi(III)}_{\text{aq}}$ jelét, viszont a cc. HNO_3 -ban detektálható jel viszonylag közel (mindössze kb. 100 ppm-re) van a $[\text{Bi(V)F}_6]^-$ -anion jelétől. Ez azt is jelentheti, hogy az extrém oxidálószerben esetleg Bi(V) van jelen. Közös gondolkodásra hívjuk a hallgatóságot a dilemmánk eldöntéséhez!

Köszönetnyilvánítás: A projektet az Európai Unió és az Európai Regionális Fejlesztési Alap „GINOP-2.3.2-15-2016-00008” és a NKFIH (K-128201) támogatta.

^{205/206}Bizmut-polioxopalladát komplexek hordozómentes radioaktív szintézise

Szerzők: Szűcs Dániel^{a, b, c}, Fekete Anikó^b, Szikra Dezső^b és Tóth Imre^a

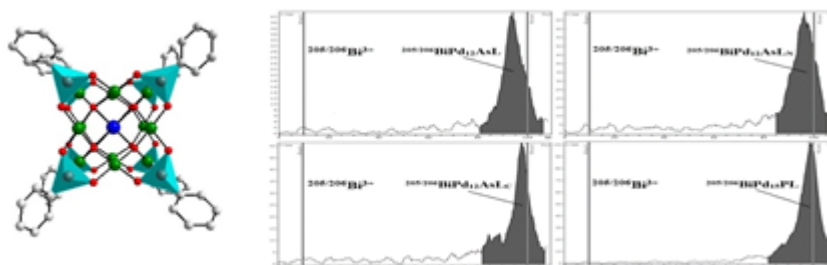
^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

^b Debreceni Egyetem, ÁOK Nukleáris Medicina Nem Önálló Tanszék

^c Debreceni Egyetem, Kémia Tudományok Doktori Iskola

e-mail: szucsdaniel94@gmail.com

A polioxometallátok (POM) régóta ismert polioxoanionok, számos területen alkalmazzák őket: pl. katalízis, gyógyászat, elektrokémia, fotokróm reakciók [1]. 2008-ban a POM-ok egyik új típusát, a polioxopalladátokat (POP) Kortz és munkatársai fedezték fel [2]. A 12 Pd(II) atomot úgynevezett „capping” csoportok stabilizálják, és ez a szerkezet egy 13. palládiumot komplexál. A középső Pd(II) különböző fémionokra cserélhető, köztük Bi(III)-ionra is, melynek alfa sugárzó ²¹³Bi izotópját tumor terápiában alkalmazzák [3]. Kortz és munkatársai mmol/dm³ oldatokból több órás reakcióval négy különböző capping csoportot (fenilarsenát, *p*-azido-fenilarzenát, *p*-karboxi-fenilarzenát, foszfonát) tartalmazó Bi-POP komplexet állítottak elő. A radioaktív Bi izotópot tartalmazó POP komplexek szintéziséhez egy másik módszer kifejlesztésére volt szükség a ²¹³Bi izotóp rövid felezési ideje ($t_{1/2} = 45,6$ min) miatt. Kutatásunk során sikeresen megvalósítottuk a négy ^{205/206}Bi-POP előállítását, kísérleteket végeztünk a tisztításukra és vizsgáltuk stabilitásukat különböző körülmények között. Kísérleteinkben a ^{205/206}Bi izotópot könnyebb hozzáférhetősége miatt használtuk a ²¹³Bi izotóp helyett.



(bal) BiPd₁₂(PhAs)₈ szerkezete (szín kód: Bi kék, Pd zöld, As türkiz, C szürke, O piros gömb); (jobb) A négyféle ^{205/206}Bi-POP radioszintézisének Radio-TLC kromatogramjai

[1] Dolbecq, A.; Dumas, E.; Mayer, C.R.; Mialane, P. *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 6009–6048.

[2] Chubarova, E. V.; Dickman, M. H.; Keita, B.; et.al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2008, *47*, 9542-9546.

[3] Tafreshi, N.K.; Doligalski, M.L.; Ti, C.J. *et al. Molecules.* **2019**, *24*(23), 4314.

Köszönetnyilvánítás: A projektet az Európai Unió és az Európai Regionális Fejlesztési Alap (GINOP-2.3.2-15-2016-00008) és a NKFIH (K-128201) támogatta.

Rákellenes 8-hidroxi-kinolin-aminosav hibridek és félszendvics Ru és Rh komplexeik előállítás és vizsgálata

Pivarcsik Tamás^a, Dömötör Orsolya^a, Mészáros János P.^a, May Nóra V.^b, Csuvik Oszkár^c, Fülöp Ferenc^c, Szatmári István^c, Spengler Gabriella^d, Enyedy Éva A.^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport

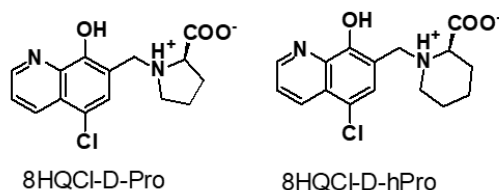
^b Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ, Budapest

^c Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerkémiai Intézet

^d Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Mikrobiológiai Intézet

e-mail: pivarcsik.tamas@chem.u-szeged.hu

Hatékony és szelektív rákellenes vegyületek kifejlesztése céljából már számos, az *in vitro* és *in vivo* tesztek alapján ígéretes Ru- és Rh-komplexet állítottak elő. Köztük találjuk a 8-hidroxi-kinolinok félszendvics fémorganikus komplexeit is [1-3]. Előadásunkban két új, vízoldható 8-hidroxi-kinolin-D-aminosav hibridnek (8HQCl-D-Pro, 8HQCl-D-hPro) és Ru(η^6 -*p*-cimol)- és Rh(η^5 -C₅Me₅)-komplexeinek az előállítását, valamint oldategyensúlyi, szerkezeti és biológiai hatásuk vizsgálataival kapott eredményeinket mutatjuk be.



Részletesen vizsgáltuk a ligandumok és komplexeik oldatbeli stabilitását és szerkezetét, biomolekulákkal (humán szérum albumin, ct-DNS) való kölcsönhatásukat és citotoxikus hatásukat érzékeny (Colo205) és multidrog rezisztens (Colo320) sejtvonalakon. Megállapítottuk, hogy a ligandumok nagyrészt semlegesek (ikerionosak) fiziológiás pH-n, és a komplexek nagy stabilitásúak széles pH-tartományban. Fluorimetriás és kapilláris zóna elektroforézises méréseink alapján a komplexek egymáshoz hasonló és nagy affinitást mutatnak az albumin felé, ugyanakkor a DNS-hez is képesek kötődni. A ligandumok és Rh-komplexeik szignifikáns citotoxicitást mutattak mind a két rákos sejtvonalon, míg a Ru-komplexeik nem bizonyultak aktívnak.

[1] M.C. Ruiz, et al., *Metallomics*, **2019**, *11*, 666.

[2] M. Kubanik, et al., *Organometallics*, **2015**, *34*, 5658.

[3] O. Dömötör, et al., *Dalton Trans.*, **2017**, *46*, 4382.

Köszönetnyilvánítás: OTKA FK 124240, GINOP-2.3.2-15-2016-00038.

Egy ambidentát piridinon-származék oldatbeli kölcsönhatása a fémorganikus $[(\eta^6\text{-}p\text{-cym})\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ és $[(\eta^5\text{-Cp}^*)\text{Rh}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ kationokkal

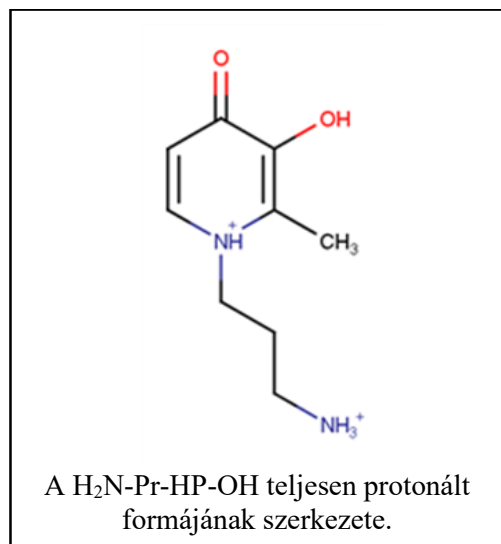
Kovács Nóra Ildikó^a, Bíró Linda^a, Buglyó Péter^a

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: linda.biro@science.unideb.hu

A daganatellenes készítmények mellékhatásainak csökkentésében, illetve a szelektivitás növelésében ígéretesnek bizonyulnak a félszendvics típusú Ru(II) és Rh(III) vegyületek. Az irodalomból jól ismert ezen fémionok N-donor preferenciája, azonban meglepően nagy stabilitású komplexek képződését írták le (O,O)-donor piron-és piridinon származékokkal, különösen a deferipronnal (1,2-dimetil-3-hidroxi-piridin-4(1H)-on), mely pH~9-10-ig képes megakadályozni a $[(\eta^6\text{-}p\text{-cym})\text{Ru}]_2(\text{OH})_3^+$ és $[(\eta^5\text{-Cp}^*)\text{Rh}]_2(\text{OH})_3^+$ hidroxidokomplexek képződését [1-3].

A fenti előzményekre támaszkodva munkánk során azt vizsgáltuk, hogy hogyan befolyásolja a komplexképződést egy nem kelátképző pozícióban jelenlévő N-donor csoport jelenléte, egy ilyen ambidentát ligandum ugyanis képes lehet telíteni az említett fémionok koordinációs szféráját. Vizsgálatainkhoz a Kutatócsoportunkban előállított 1-(3-aminopropil)-3-hidroxi-2-metilpiridin-4(1H)-on (H₂N-Pr-HP-OH) ligandumot választottuk modellként. A képződő komplexek összetételének és stabilitási állandóinak meghatározására, valamint legvalószínűbb oldatszerkezetének felderítésére pH-potenciometriás, ¹H NMR spektroszkópiás és ESI-TOF-MS módszereket alkalmaztunk.



- [1] L. Bíró, E. Farkas, P. Buglyó, *Dalton Trans.*, **2010**, 39(42), 10272-10278.
- [2] O. Dömötör, S. Aicher, M. Schmidlehner, M.S. Novak, A. Roller, M.A. Jakupec, W. Kandioller, C. G. Hartinger, B.K. Keppler, É.A. Enyedy, *J. Inorg. Biochem.*, **2014**, 134, 57-65.
- [3] É.A. Enyedy, O. Dömötör, C.M. Hackl, A. Roller, M.S. Novak, M.A. Jakupec, B.K. Keppler, W. Kandioller, *J. Coord. Chem.*, **2015**, 68(9), 1583-1601.

Egyszeresen helyettesített piklén származék ligandumok és Mn(II)-komplexeik kémiai jellemzése: egyensúly, kinetika, relaxometria

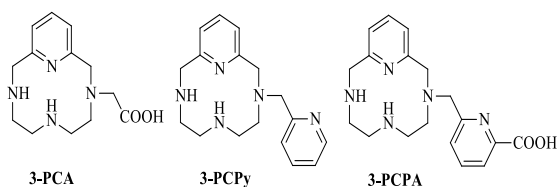
*Garda Zoltán^a, Gwladys Nizou^b, Molnár Enikő^a, Madarasi Enikő^a, Verner Bettina^a,
Kálmán Ferenc Krisztián^a, Maryline Beyler^b, Raphaël Tripier^b, Tircsó Gyula^a*

^a Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1., Magyarország

^b University of Brest, UMR-CNRS 6521 CEMCA, 29238 Brest, France

e-mail: garda.zoltan@science.unideb.hu

A mágneses rezonanciás képalkotás (MRI) Gd(III)-ion alapú kontrasztanyagaival kapcsolatba hozott problémák (pl. a Nefrogén Szisztémás Fibrózis betegség[1], a Gd felhalmozódása egészséges vesefunkciójú páciensek csontjaiban[2], ill. a pozitív Gd anomália[3]) miatt egyre nagyobb figyelem övezi a paramágneses átmeneti fémionok komplexeit, ezek közül is főként Mn(II)-komplexeiket. A kutatócsoportunk már több, mint egy évtizede intenzív kutatásokat végez megfelelő alternatívát kínáló Mn(II)-ion alapú kontrasztanyagok kifejlesztését célozva. Az optimális ligandum szerkezet megtalálásához számos paraméter finombeállítását kell elvégeznünk, úgy mint az oldalláncok száma és helyzete a makrociklusos gyűrűn, az oldallánc(ok)ban található donor atomok minőségének a változtatása, stb. Jelen előadás keretein belül három (3-PCA, 3-PCPy és 3-PCPA), a makrociklusban lévő piridin gyűrűhöz *cisz*-helyzetben egyszeresen helyettesített ligandum (1. ábra) Mn(II)-komplexének koordinációs kémiai jellemzését tervezem bemutatni, kitérve a kelátok egyensúlyi, kinetikai és relaxometriás tulajdonságaira. A vizsgálataink eredményei alapján, a 3-PCPA ligandum Mn(II)-komplexe rendelkezik a legjobb paraméterekkel: $\log K_{[Mn(3-PCPA)]^{2+}} = 16.61$ (pMn= 8,88,



1. ábra: A vizsgált ligandumok szerkezeti képletei

pH= 7,4 és $c_{\text{lig}}=c_{\text{Mn}^{2+}}=10 \mu\text{M}$), $t_{1/2}= 122$ perc (pH= 6,0), $r_{1p}= 2,45 \text{ mM}^{-1}\text{s}^{-1}$ (25 °C, 1,41 T), továbbá ezen adatok alapján a pikolinátsoportra hasznos „építőelemként” tekinthetünk a további ligandum tervezések során.

[1] **a**, Shawn E., Cowper. *Curr. Opin. Rheumatol.*, **2003**, *15* (6), 785; **b**, Grobner, T., *Nephrol. Dial. Transplant.*, **2006**, *21* (4), 1104.

[2] **a**, Errante, Y.; Cirimele, V.; Mallio, C. A.; Di Lazzaro, V.; Zobel, B. B.; Quattrocchi, C. C., *Invest. Radiol.*, **2014**, *49* (10), 685; **b**, Karabulut, N., *Interv. Radiol.* **2015**, *21* (4), 269.

[3] Bau, M.; Dulski, P., *Sci. Lett.*, **1996**, *143* (1–4), 245.

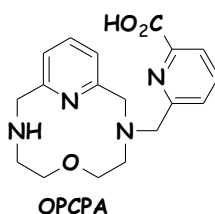
Köszönetnyilvánítás: A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 és 134694 sz. pályázatai támogatták.

Legőzés molekuláris szinten: Mn(II)-komplexálására alkalmas ligandumok tervezése és előállítása koordinációs kémiai módszerekkel

*Lakatos Gergő^a, Csupász Tibor^a, Kálmán Ferenc K.^a, Madarasi Enikő^a, Tóth-Molnár Enikő^a,
Tircsó Gyula^a*

^a Debreceni Egyetem TTK, Fizikai Kémia Tanszék, Ritka(föld)fém Kutatócsoport
e-mail: 99lakatosgergo@gmail.com

A Mn(II)-alapú kontrasztanyagokkal kapcsolatban számos biztató eredmény látott napvilágot az utóbbi években, de az inert Mn(II)komplexek felkutatása a mai napig aktuális terület maradt, a jelenleg piacvezető Gd(III)-alapú szerekkel kapcsolatban felmerült biztonsági aggályok miatt[1,2,3]. Munkánk során megterveztünk és előállítottunk egy olyan hatfogú makrociklusos komplexképzőt (OPCPA), amely két korábban jól teljesítő Mn(II)-kötő ágens szerkezeti elemeit egyesíti magában.



A vizsgálataink alapján [Mn(OPCPA)]⁺-komplex termodinamikailag stabil és viszonylag nagy relaxivitással rendelkezik. Előbbi a kelátor nagy összbázicitásával, utóbbi pedig a központi fémion belső koordinációs szférájában megtalálható vízmolekulával magyarázható – melynek jelenlétét ¹⁷O NMR mérésekkel bizonyítottuk. A komplex inertségét változatos körülmények közt vizsgáltuk. Meglepő módon Cu(II)-ionnal végzett fémcserereakciók alapján a kelát alulmúlja az anyavegyületek esetében tapasztalt inertséget. Ez feltehetően a komplex szerkezeti aspektusaival magyarázható. Vércsérumban, fiziológiás pH-n a kelát inertnek bizonyult és meglepő módon nagy affinitást mutatott a Humán Szérum Albumin (HSA) plazmafehérjéhez, amelynek angiográfiás vizsgálatok során lehet jelentősége.

- [1] T. Grobner, *Nephrol. Dial. Transplant.* **2006**, *4*, 1104-1108
 [2] T. Kanda, T. Fukusato, M. Matsuda, K. Toyoda, H. Oba, J. Kotoku, T. Haruyama, K. Kitajima, S. Furui, *Radiology* **2015**, *1*, 228-232
 [3] P. Ebrahimi, M. Barbieri, *Geosciences* **2019**, *9*, 93

Köszönetnyilvánítás: A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 és 134694 sz. pályázatai támogatták.

A Mn(II)-ion komplexálására alkalmas bifunkciós ligandumok előállítására és összehasonlító jellemzése

Várad Balázs^{a,b}, Garda Zoltán^a, Madarasi Enikő^{a,b}, Brezovcsik Károly^c, Szűcs Zoltán^c,
Tóth Imre^a, Tircsó Gyula^a

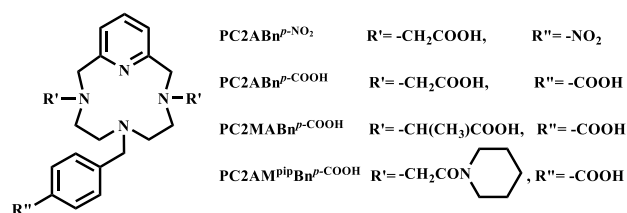
^a Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémiai Tanszék;

^b Debreceni Egyetem, Kémia Tudományok Doktori Iskola;

^c Atommagkutató Intézet, Debrecen.

e-mail: varadi.balazs@science.unideb.hu

A Mn-izotópjai között az MRI (a stabil ⁵⁵Mn) és PET vizsgálatokban (pl. pozitron-sugárzó ⁵²Mn) hasznosítható izotópok egyaránt megtalálhatók. Ennek köszönhetően a bifunkciós (BF) ligandumokkal képzett komplexei kiváló jelöltek lehetnek mindkét modalitás kontrasztanyagaként. Az irodalom alapján a Mn(II)-komplexálását többnyire nyíltláncú ligandumokra alapozzák azonban a köztudottan jobb paraméterekkel rendelkező makrociklusos BF kelátorok ritkák. Munkánk során négy piklén származék BF ligandumot állítottunk elő (1. ábra), és vizsgáltuk a Mn(II)-ionnal képződő kelátjaik tulajdonágait. Meghatároztuk a komplexképzők protonálódási állandóit, a Mn(II)-ionnal képződő komplexeik stabilitását, tanulmányoztuk a komplexek disszociációs kinetikáját és meghatároztuk a kelátok relaxivitását. Ezt követően elvégeztük a komplexképzők ⁵²Mn izotóppal való jelölését, különböző hígításoknál, illetve vizsgáltuk a megjelölt komplexek disszociációját *transz*-CDTA kicserélő ligandum jelenlétében. Az előadás során ezen eredmények összehasonlító elemzését kívánjuk bemutatni.



1. ábra. Az előállított és vizsgált ligandumok szerkezeti képlete.

Köszönetnyilvánítás: A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 és 134694 sz. pályázatai támogatták.

A publikáció, illetve az annak keretében ismertett tudományos eredmény a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Richter Gedeon Talentum Alapítvány (székhely: 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.) támogatásával, „Richter Talentum PhD. ösztöndíj” keretében készült.

AZ INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI MINISZTERIUM KOOPERATÍV DOKTORI PROGRAM DOKTORI HALLGATÓI ÖSZTÖNDÍJ PROGRAMJÁNAK A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL FINANSZÍROZOTT SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.

Nagy felbontású NMR módszerek alkalmazása foszfortartalmú fémkomplexek szerkezetvizsgálatára

Timári István^a, Bagi Péter^b, Keglevich György^b, E. Kövér Katalin^{c,d}

^a Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszék

^b Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszék

^c Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^d MTA-DE Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport

e-mail: timari.istvan@science.unideb.hu

A mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópia az egyik leghatékonyabb eszköz molekulák szerkezetének atomi szintű jellemzésére. Ugyan a spin-spin csatolás az egyik legfontosabb, szerkezeti információt hordozó NMR jelenség, de a hatására létrejövő vonalfelhasadások jelentősen bonyolítják a spektrumokat, csökkentik a felbontásukat, jelátfedéseket eredményeznek, és ezáltal gyakran megnehezítik a vizsgált molekula szerkezetigazolását. Jelátfedésekből származó problémákkal leggyakrabban ¹H spektrumok/dimenziók esetén szembesülhetünk, mely egyrészt a korlátozott kémiai eltolódás tartománynak (~10-15 ppm), másrészt a proton-proton csatolások okozta kiterjedt felhasadásoknak köszönhető.[1,2] Foszfortartalmú fémkomplexek ¹H NMR spektrumai tovább bonyolódnak a proton-foszfor csatolások miatt. Előadásomban olyan korszerű, szélessávú homo- és heteronukleárisan lecsatolt, ¹H detektálású NMR kísérleteket mutatok be, amelyek egyszerűbbé és pontosabbá tehetik foszfortartalmú fémkomplexek szerkezetvizsgálatát.

[1] Zangger, K. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **2015**, 86–87, 1.

[2] M. Foroozandeh, G. A. Morris, M. Nilsson, *Chem. Eur. J.* **2018**, 24, 13988.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00372/20/7), a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott NKFI PD-135034 pályázat, és az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-5-DE-262 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának anyagi támogatásával valósult meg.

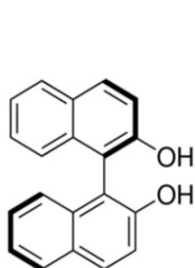
Időben változó méretű molekulák diffúziója (A mátrix-segített DOSY kísérlet legújabb mutációi)

Szalontai Gábor

Pannon Egyetem, NMR laboratórium

e-mail: szalontai.gabor@icloud.com

A diffúzió-rendezett spektroszkópia (DOSY) egy olyan 2D NMR eljárás, amely lehetővé teszi eltérő translációs diffúziós együtthatójú molekulák virtuális szétválasztását és az együtthatók meghatározását [1]. Az elérhető „diffúziós” és „kémiai eltolódás” felbontások azonban korlátozottak, javításukra számos javaslat született, az előadásban ezek közül a „mátrix-módosított” változatok [2] hatékonyságáról lesz szó. A sokféle lehetséges mátrix közül a régóta ismert királis szolvatóló ágensek (CSA) és a kémiai eltolódás felbontását javító paramágneses lantanida adalékok (LSR) hatékonyságát vizsgáltam, mert ezek esetében elvileg mindkét dimenzió felbontása javulhat.



Komplex egyensúlyok időben változó méretű és formájú komponenseinek mért (látszólagos) diffúziója természetesen függ a pl. a cseresebbségi állandótól is. Ligandumként közismert, kis méretű, szerves

molekulákat választottam (pl. L-mentol, (R,S)-kámfor), mátrixként pedig a CSA ágens S-BINOL és egy akirális LSR reagens, az $\text{Eu}(\text{fod})_3$ szerepelt.

Használatuk esetén a kémiai eltolódás dimenzióban a változás általában igen jelentős, különösen az LSR mátrix alkalmazása esetén, a diffúziós dimenzióban elérhető javulás értelemszerűen erősen függ a létrejövő kölcsönhatás erősségétől és ebből kifolyólag az addukt élettartamától. A kapott diffúziós együtthatókból - a Stokes-Einstein egyenletből származtatott különböző empirikus közelítő formulák [3] segítségével - a kérdéses addukt mérete, illetve fordítva, a méret ismeretében a várható diffúziós együttható jól becsülhető. Mindezek alapján az eljárás komplexkémiai alkalmazása ígéretes.

[1] W.S. Price, *Concepts in Nuclear Magnetic Resonance Part I*, 1997, 9, 299.

[2] I.J. Day, *Progress in NMR Spectroscopy*, 2020, 116, 1.

[3] R. Evans, G. Dal Poggetto, M. Nilsson, G.A. Morris, *Anal. Chem.* 2018, 90, 3987.

Szulfid oldalláncot tartalmazó makrociklusok, mint lehetséges $^{64/67}\text{Cu}$ radioterápiás komplexképzők koordinációs kémiai vizsgálata

Marianna Tosato^a, Marco Dalla Tiezza^a, Nóra V. May^b, Abdirisak Ahmed Isse^a, Sonia Nardella^a, Laura Orian^a, Marco Verona^c, Christian Vaccarin^c, André Alker^d, Helmut Mäcke^e, Paolo Pastore^a, Valerio Di Marco^a

^a Department of Chemical Sciences, University of Padova, Padova, Italy

^b Szerkezetkutató Központ, Természettudományi Kutatóközpont, Budapest, Hungary

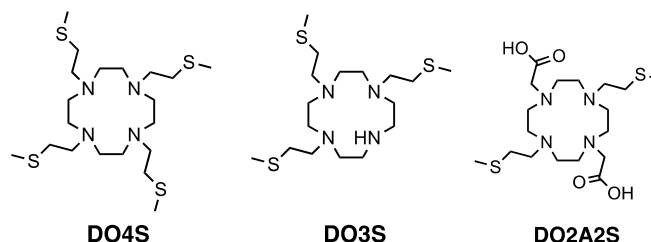
^c Department of Pharmaceutical Sciences, University of Padova, Padova, Italy

^d Roche Innovation Center Basel F. Hoffmann-La Roche, Basel, Switzerland

^e Department of Nuclear Medicine, University Hospital Freiburg, Freiburg, Germany

e-mail: may.nora@ttk.hu

A radioterápiás fém-komplexek fejlesztésében a réz különösen nagy jelentőségű, mert számos olyan radioizotóppal rendelkezik, amelyek alkalmassá teszik diagnosztikai és sugárterápiás alkalmazásokra. A $^{64/67}\text{Cu}$ koordinációjára alkalmas kelátoroknak nagyfokú termodinamikai és kinetikai stabilitással kell rendelkezniük az esetleges ligandumcsere vagy fémioncsere reakciók elkerülése érdekében. A Cu^{2+} esetén in vivo redukáló szerek jelenlétében Cu^+ képződhet, amely markánsan eltérő koordinációs preferenciákkal rendelkezik, mint a Cu^{2+} , így könnyen előfordulhat a komplex disszociációja biológiai környezetben. Ennek elkerülésére szulfid oldalláncokat tartalmazó makrociklusok lehetséges alkalmazását vizsgáltuk, amely a fémiont mindkét oxidációs állapotában megfelelő erősségek koordinálja.



A Cu^{2+} -komplexek oldatbeli szerkezetét ESR spektroszkópiával, míg a szilárd fázisú szerkezetét egykristály röntgendiffrakcióval vizsgáltuk. Az eredmények értelmezéséhez elméleti számítások (DFT) nyújtottak segítséget.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal – NKFIH OTKA K124544 valamint a Legnaro National Laboratories, Italian Institute of Nuclear Physics (INFN) által támogatott ISOLPHARM_EIRA project segítségével valósult meg.

Szerin oldallánc hatása peptidek 4N nikk(II)-komplexeire

Grenács Ágnes, Sándor Balázs, Pálincás Dóra Csilla, Várnagy Katalin

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: grenacs.agnes@science.unideb.hu

A hisztidint tartalmazó peptidek vizsgálata átmenetifém-ionokkal már évtizedek óta folyik, mivel a fehérjék és fémionok kölcsönhatásai alapvető fontosságú biológiai folyamatok alapját jelentik. Koordinációs kémiai szempontból alapos és átfogó eredmények születtek kutatócsoportunkban is. A kulcsfontosságú funkciós csoportok körén kívül azonban az eddig gyengén vagy nem koordinálódó oldalláncként jellemzett hidroxilcsoport hozzájárulása jelentős változást mutat a nikk(II)ionok és peptidek kölcsönhatásában. [1,2]

Munkánk során olyan szekvenciákat vizsgáltunk, melyek az XaaZaaSer– vagy a –SerXaaHis motívumot tartalmazzák, így a szerin részlet a koordinációs szféra telítésekor kerül a fémion közvetlen környezetébe és a spektrális jellemzése során szokatlan eredményeket hoz. Ismert, hogy az –SXH– motívumot tartalmazó peptidek többszörös mennyiségű nikk(II)ion jelenlétében, enyhén bázikus körülmények között szelektív hidrolízist szenvednek. [3] A reakció lejátódását azonban emelt hőmérséklet és többszörös nikk(II)ion felesleg mellett vizsgálták, és ilyen körülmények között is több óra elteltével tudták kimutatni a hidrolízis közti- és végtermékeit. Az oldategyensúlyi és spektroszkópiai vizsgálatok során azonban szobahőmérsékleten, a fémkötőhelyek számának megfelelő mennyiségű nikk(II)ion jelenlétében is mutatkozik olyan szerkezeti változás, amely előszobája lehet a ligandum szelektív hidrolízisének. A képződő részecskék szerkezetét és a szobahőmérsékleten lejátódó folyamatok reverzibilitását vizsgáltuk annak érdekében, hogy választ találjunk a szerin különleges szerepére ezekben a pozíciókban.

[1] W. Bal, J. Lukszo, K. Bialkowski, K.S. Kasprzak, *Chem.Res.Toxicol.*, **1988**, *11*, 1014-1023.

[2] M. Lukács, G. Szunyog, Á. Grenács, N. Lihi, C. Kállay, G. Di Natale, T. Campagna, V. Lanza, G. Tabbi, G. Pappalardo, I. Sóvágó, K. Várnagy, *ChemPlusChem*, **2019**, *84*, 1697-1708.

[3] E. Kopera, A. Krezel, A.M. Protas, A. Belczyk, A. Bonna, A. Wysłouch-Cieszynska, J. Poznanski, W. Bal, *Inorg. Chem.*, **2010**, *49*, 6636-6645.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NKFIH K115480 számú pályázatának támogatásával valósult meg.

Hidroxipiridinon származékok komplexképző sajátosságainak vizsgálata

Nagy Sándor^a, Ozsváth András^a, Bényei Attila^b, Farkas Etelka^a, Buglyó Péter^a

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

e-mail: nagy.sandor@science.unideb.hu

A ciszplatin és más síknégyzetes Pt(II) komplexek évtizedek óta sikeresen alkalmazott kemoterápiás készítmények, azonban ezektől eltekintve csak néhány ígéretes fémvegyületet sikerült előállítani (KP1019, NAMI A stb.), amelyek a klinikai kipróbálás fázisáig is eljutottak.

Az ilyen típusú vegyületek továbbfejlesztésének, szelektivitásuk növelésének egy lehetséges módja lehet, amikor a jól ismert daganatellenes hatású platinafém-et és a hipoxia-aktiválásért felelős Co(III) részecskéket egy vegyületben kombináljuk [1]. Ezek a kétfémes komplexek egy linker molekula segítségével nyerhetők, amely egy időben képes megkötni mind a két fémiont. Erre a célra pedig ideálisak lehetnek a széles körűen tanulmányozott hidroxipiridinon származékok.

Ezek alapján munkánk során először a maltolt 1,3-diaminopropánnal reagáltatva képeztük a megfelelő hidroxipiridinon származékot [2]. Az így nyert aminből piridin-2-karbaldehid, illetve pirrol-2-karbaldehid jelenlétében a megfelelő iminekhez majd végezetül azok redukált származékjaihoz jutottunk. Az így előállított vegyületek oxigén donor atomjaikon keresztül képesek lehetnek megkötni a hipoxia-aktiválásért felelős kobalt(III) részt, míg nitrogén donoratombjaikon keresztül platinafémionok komplexbe vitelére is alkalmasak lehetnek. Az előállított ligandumok sav-bázis tulajdonságait pH-potenciometriát és NMR spektroszkópiát alkalmazva vizsgáltuk, míg a fémmegkötő sajátosságait Pd(II), $[(\eta^6\text{-}p\text{-cym})\text{Ru}]^{2+}$ és $[(\eta^5\text{-Cp}^*)\text{Rh}]^{2+}$ ($p\text{-cym}$ = 1-meil-4-izopropilbenzol, Cp^* = pentametil-ciklopentadienil anion) ionok jelenlétében tanulmányoztuk. Részletes oldategyensúlyi vizsgálataink eredményei szerint a piridin származékhoz képes a pirrol származék kevésbé hatékony (N,N) kelátor és 2:1 fémion- ligandum arányánál a második fémion hidrolízisét sem tudja megakadályozni. Ezzel szemben a piridin származék ideális jelöltnek tűnik kétfémes komplexek előállításához.

[1] I. Nagy, E. Farkas, J. Kasparkova, H. Kostrhunova, V. Brabec, P. Buglyó, *J. Organomet. Chem.*, **2020**, *916*, 121265.

[2] M. A. Santos, R. Grazina A. Q Neto, G. Cantinho, L. Gano, L. Patrício, *J. Inorg. Biochem.* **2000**, *78*, 303-311.

Interaction of half-sandwich (Cp*)Rh(III) cation with some biologically relevant oligopeptides

Azza A. Hassoon^a, Attila Szorcsik^a, Ibolya Papp^b, Livia Fülöp^b, Zoltán Kele^b, Tamás Gajda^a

^a Department of Inorganic and Analytical Chemistry, University of Szeged, Hungary

^b Institute of Medical Chemistry, University of Szeged, Dóm tér 8, H-6720 Szeged, Hungary

e-mail: azza_ahmed@hotmail.com

Platinum-based antitumor compounds play a crucial role in the treatment of various solid tumors, increasing drug resistance and the emergence of unwanted side effects to currently available therapies have bred a need for the development of new metal-based drugs with fewer side-effects and with different mechanisms of action. In recent years an increasing number of half-sandwich (arene)Ru(II) complexes have been reported to possess significant anticancer activity, even against cancers that are not responsive to platinum drugs. Although, considerably less experimental data have been published for the isoelectronic (arene)Rh(III) compounds, several (η^5 -Cp*)Rh(III) complexes exhibit higher *in vitro* activity than the related Ru(II) complexes or even cisplatin. These Rh-based compounds can act using both DNA or enzymes as target, but even DNA targeting compounds may interact with proteins or endogenous peptides during drug-transport, e.g. may undergo ligand substitution reactions especially in the blood plasma [1-2]. It is therefore of high interest to investigate reactions between potential metallodrugs and biomolecules. To this end, here we report systematic solution thermodynamic and solution structural study on the interaction of (Cp*)Rh(III) cation with some endogenous peptides exist in human body (carnosine, carcinine, GHK-OH and glutathione (GSH)) and HHHG as a model of multihistidine peptides. In order to mimic the interaction of the (Cp*)Rh(III)-based potentially anticancer/drug delivery agents with proteins, we also studied ternary systems with 2,2'-bipyridyl or ethylene-diamine.

[1] Azza A. Hassoon, Attila Szorcsik, Ferenc Bogár, Ibolya Z. Papp, Livia Fülöp, Zoltán Kele, Tamás Gajda, *J. Inorg Biochem.*, **2021**, 216, 111330.

[2] Dömötör, O., Enyedy, É.A., *J Biol Inorg Chem.*, **2019**, 24, 703–719

Acknowledgements: This research was supported by National Research, Development and Innovation Office (NKFIH) through the project GINOP-2.3.2-15-2016-00038. A. A. H. thanks Stipendium Hungaricum for her PhD fellowship, which is also supported by the Cultural Affairs & Mission Sector in Egypt.

Makrociklusban oxigénatomot tartalmazó komplexképző előállítás és Mn(II)-komplexének vizsgálata angiográfias képalkotáshoz

Kapus István^a, Csupász Tibor^{a, b}, Tircsó Gyula^a

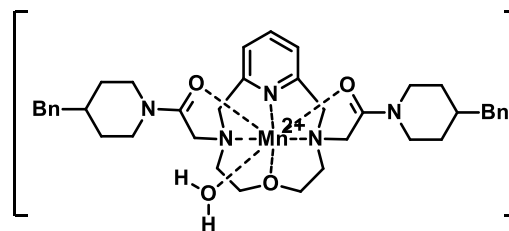
^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

^b Debreceni Egyetem, Kémia Tudományok Doktori Iskola

e-mail: csupasz.tibor@science.unideb.hu

Az MRI egyik speciális alkalmazása a mágneses rezonanciás angiográfia (MRA), amely neminvazív módon szolgáltat információt az emberi szervezet teljes érrendszeréről. A módszer érzékenységének növelése érdekében kontrasztanyagokat (CA) alkalmaznak, amely CA-ok („blood-pool” CA-k) a véráramban található HSA fehérjéhez kötődnek nem kovalensen. Ezen kölcsönhatás eredményeként a keletkező adduktum megnövekedett relaxivitásának köszönhetően láthatóvá válnak a véredények. Az irodalomban található, „blood-pool” CA-ok a paramágneses Gd(III)- és Mn(II)-ion komplexei [1,2], melyek közül két Gd(III)-kompleznek sikerült a klinikai kipróbálás második fázisát is teljesíteni.[3]

Az oxotriaza-biciklopentadeca-trién (O-piklén) makrociklusból származtatott ligandumok potenciális jelölteknek tekinthetők a Mn(II)-ion komplexálására, mivel az eddig vizsgált legtöbb származék Mn(II)-komplexe megfelelően inert és jó relaxációs tulajdonsággal rendelkezik. Az általunk előállított $[Mn(OPC2AM^{PipBn})]^{2+}$ -komplex (1. ábra) benzilcsoportokat tartalmaz, amelyek segítségével a komplex képes a Humán Szérum Albumin (HSA) fehérjével kölcsönhatást kialakítani. Az előadásom során a potenciális „blood-pool” CA-nak megfelelő $[Mn(OPC2AM^{PipBn})]^{2+}$ -komplex előállítását, fizikai-kémiai jellemzését és HSA fehérjével való kölcsönhatás mértékének a vizsgálatát bemutató eredményeinket ismertetem majd.



1. ábra. $[Mn(OPC2AM^{PipBn})]^{2+}$ -komplex

[1] S. Aime, et. al.; *J. Biol. Inorg. Chem.*, **1996**, *1*, 312–319.

[2] S. Aime, et. al.; *J. Biol. Inorg. Chem.*, **2002**, *7*, 58-67.

[3] D. A. Bluemke, et. al.; *Radiology*, **2001**, *219*, 114–122.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. Az anyagi támogatásért köszönet illeti a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalt (az NKFIH-120224 és 134694 sz. pályázata) is.

Bi(III)-komplexek kémiai jellemzése, orvosdiagnosztikai és terápiás célú felhasználásukhoz

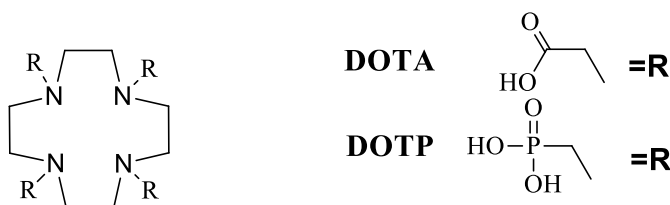
Horváth Dávid,^a Baranyai Zsolt,^b Tircsó Gyula^a és Tóth Imre^a

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen Egyetem tér 1.

^b Bracco Imaging – CRB Trieste, AREA Science Park Ed. Q; S.S. 14 Km 163.5, 34149 Basovizza (TS), Italy

e-mail: horvath.david@science.unideb.hu

Targetált Alfa Terápiában (TAT) kezelésekben való felhasználás céljából egyre nagyobb érdeklődés övezi a ²¹³Bi (β: 97.9%; α: 2.1 %, $t_{1/2}$ =45.6 perc) izotópot, amely ²²⁵Ac/²¹³Bi generátorral könnyen előállítható.[1] Mivel a makrociklusos DOTA és DOTP ligandumokkal képződő Bi(III)-komplexek ezen sajátságait korábban nem, vagy csak részletekben tanulmányozták [2], így munkánk során célul tűztük ki *in vivo* terápiás kezelésekben alkalmazható [Bi(DOTA)]⁻ és [Bi(DOTP)]⁵⁻-komplexek oldategyensúlyi, képződés és disszociációs kinetikai, valamint szerkezeti sajátságainak felderítését fiziológiához közeli körülmények mellett. A vizsgált komplexek esetében az eredmények azt mutatják, hogy a komplexek megfelelő ($\log K_{[Bi(DOTA)]^-}=30,86$), ill. kiemelkedő ($\log K_{[Bi(H_4DOTP)]^{5-}}=60,65$) stabilitással rendelkeznek. A [Bi(DOTP)]⁵⁻-komplex meglepően nagy inertséggel (pH=3-nál a disszociációra jellemző felezési idő $t_{1/2} = 48000$ óra) is rendelkezik, valamint a radiojelzések tekintetében rendkívül gyors képződési kinetika jellemzi a komplex képződését (savas pH-n a stopped-flow időskáláján mérhető képződési sebességgel. Ezen eredmények alapján a foszfonát származékoknak kiemelt szerep jut a jövő Bi(III)-alapú radiofarmakonok tervezésében.



1. ábra A H₄DOTA és H₈DOTP ligandumok szerkezete

- [1] Alfred Morgenstern, Christos Apostolidis, Frank Bruchertseifer, Supply and Clinical Application of Actinium-225 and Bismuth-213, *Seminars in Nuclear Medicine*, **2020**, *50*, 119–123.
- [2] É. Csajbók, Z. Baranyai, I. Bányai, E. Brücher, R. Király, A. Müller-Fahmow, J. Platzeck, B. Radüchel, M. Schäfer, *Inorg. Chem.*, **2003**, *42*, 2342–2349

Köszönetnyilvánítás: A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 és 134694 sz. pályázatai támogatták.

Új típusú Cu(II)-komplexek radioteranosztikai alkalmazásokhoz

Csupász Tibor,^{a,b} Lihi Norbert,^c Fekete Zsuzsa,^a Nagy Antónia,^a Botár Richárd,^a
 Forgács Viktória,^d Szikra Dezső,^d Tircsó Gyula^a és Kálmán Ferenc Krisztián^a

^a DE, TTK, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b DE, Kémia Tudományok Doktori Iskola

^c DE, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^d DE, ÁOK, Nukleáris Medicina Nem Önálló Tanszék, 4032 Debrecen, Nagyerdei krt. 98.

e-mail: kalman.ferenc@science.unideb.hu

Annak ellenére, hogy a modern orvostudomány több évtizede harcol az emberiséget sújtó egyik legváltozatosabb és bármikor megújulni képes betegsége ellen, a tumoros elváltozások gyógyításának mind a mai napig a legerősebb fegyvere a korai diagnosztika. A korai diagnosztika egyik eszköze a pozitron emissziós tomográfia, más néven PET. A PET technika legelterjedtebben alkalmazott radiodiagnosztikuma az FDG (fluoro-deoxi-glükóz), amely a fluor 18-as izotópját tartalmazza kovalensen kötött formában. Értelemszerűen egy szerves kémiai reakciót is magában foglaló kontrasztanyag előállításnál sokkal kedvezőbb lenne olyan diagnosztikumokat fejleszteni, amelyekben például komplexképzéssel megoldható az izotóp megkötése. Erre a célra alkalmasak a pozitron sugárzó fémionok, például a réz 64-es izotópjá is ($t_{1/2}=12,7$ óra, β^+ 18%, β^- 39%, Auger elektronok), amelyet a megfelelő kelátorral komplexálva nemcsak diagnosztikai, de terápiás célból is alkalmazni lehet. A radioizotópokkal végzett munka majdnem minden esetben versenyfutás az idővel, ezért olyan kelátorokra van szükség, amelyek savas közegben is gyorsan képeznek komplexet az adott fémionnal $\mu\text{M}/\text{nM}$ -os koncentráció tartományban. A biciklusos 1,4,7,10,13-pentaazabiciklo{8.5.2}heptadekán szintézisét már több mint 2 évtizede leírták,^[1] ugyanakkor eddig Cu(II)-komplexének részletes koordinációs kémiai vizsgálata nem történt meg. Munkánk során sikeresen szintetizáltuk az említett ligandumot, valamint bifunkciós származékát és a vizsgálatokból az is kiderült, hogy a *para*-nitrobenzil linkerrel ellátott makrociklus még 60 nM-os koncentrációban is 50%-ban jelölhető a ⁶⁴Cu(II)-ionnal, valamint nagy inertsége mellett ($t_{1/2,\text{dissz}}=2,1$ óra 50 °C-on 5 M-os HCl-oldatban), a komplex képződés 5 perc alatt lejátszódik enyhén savas közegben (pH=5), ami kiemelkedő a merevszerkezetű Cu(II)-komplexek között.

[1] H. S. Winchell, et al. **1997**, WO1997001360A2.

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönetüket fejezik ki az anyagi támogatásért a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-134694 és FK-134551 pályázatainak.

Egy O-piklén származék ligandum Mn(II)-komplexének koordinációs kémiai vizsgálata

Nagy Antónia^a, Csupász Tibor^{a,b}, Kálmán Ferenc K.^a és Tircsó Gyula^a

^a Debreceni Egyetem, TTK, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Debreceni Egyetem, Kémia Tudományok Doktori Iskola

e-mail: antonia.antonia8@gmail.com

A '90-es évek vége óta tudjuk, hogy az orvosi diagnosztika terén nagy jelentőséggel bíró Mágneses Rezonanciás Képzéskészítés (MRI) kontrasztanyagok között van néhány, amelyek inertsége nem megfelelő a vesefunkciójukban károsodott betegek vizsgálatára. Ezek az elősorban nyíltláncú amino-polikarboxilát ligandumot tartalmazó Gd(III)-komplexek a szervezetben tartózkodás ideje alatt olyan cserereakciókban vesznek részt, amelyek a Gd(III)-ion felszabadulásához és toxicitása miatt, mérgezéshez vezetnek. A probléma kiküszöbölésére (azon túl, hogy korlátozták vagy megtiltották ezen kontrasztanyagok használatát) két kutatási irány vált hangsúlyosabbá, amelyekben vagy a Gd(III)-alapú komplexek inertségének növelésére fókuszáltak, vagy a Gd(III)-ion helyettesítésére olyan paramágneses fémionnal, ami a szervezet számára jobban tolerálható. A Gd(III) helyettesítésére az egyik ígéretes jelölt a Mn(II)-ion, amely bár paramágneses tulajdonságait tekintve gyengébb a Gd(III)-nál, de esszenciális fémion, így kevésbé terheli a szervezetet.

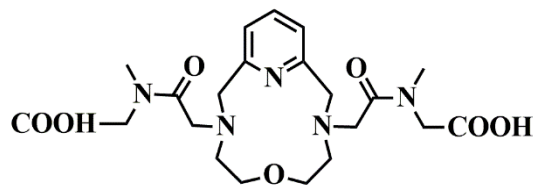
Csoportunkban már több mint 10 éve foglalkoznak Mn(II)-ion komplexálására alkalmas ligandumok fejlesztésével, amely kutatásnak egyik terméke az 1. ábrán látható

OPC2AM^{sarc} ligandum. Munkánk során az

ezen kelátor esszenciális fémionokkal kialakuló komplexei (Mg(II), Ca(II), Mn(II),

Zn(II) és Cu(II)) oldategyensúlyát, a Mn(II)-

komplex inertségét, relaxációs tulajdonságait



1. ábra A vizsgált ligandum szerkezeti képlete.

és a komplexben kötött vízmolekula cseresebességét is vizsgáltuk. A vizsgálatokból kiderült, hogy a [Mn(OPC2AM^{sarc})]-komplex megfelelően nagy termodinamikai stabilitással ($pMn=7,61$), nagy inertséggel ($t_{1/2}=40,3$ óra, $pH=6,0$, 37 °C) és relaxivitással ($r_{1p}=3,15$ és $r_{2p}=9,97$ $mM^{-1}s^{-1}$, 37 °C, 60 MHz) rendelkezik, ami alkalmassá teszi azt az *in vivo* felhasználásra.

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönetüket fejezik ki az anyagi támogatásért a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224, K-134694, és FK-134551 pályázatainak.

Merevgerincű pikolinát-csoportot tartalmazó Mn(II)-alapú MRI kontrasztanyag-jelölt előállítás és koordinációs kémiai jellemzése

*Sajtos Gergő Zoltán^a, Váradi Balázs^a, Madarasi Enikő^a, Molnár Enikő^a,
Kálmán Ferenc Krisztián^a, Tircsó Gyula^a*

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, Ritka(föld)fém Kutatócsoport
e-mail: sajtosgeri@gmail.com

A modern orvosi diagnosztika kétségkívül egyik legdinamikusabban fejlődő képalkotó módszere az MRI. A módszer diagnosztikai értékét javítandó kontrasztanyagokat alkalmaznak (Gd(III)-komplexek), amelyek biztonságossága megkérdőjeleződött az elmúlt években. Az esszenciális fémionra alapozó Mn(II)-kelátok alternatívát jelenthetnek ezen vegyületekkel szemben és a segítségükkel intelligens/okos kontrasztanyagok kifejlesztésére is lehetőség van.[1]

Az általunk előállított pikolinát-oldalláncot tartalmazó makrociklusos kelátort (a BPPA) a korábban vizsgált ligandumok szerkezeti elemeinek a kombinációjával terveztük meg és állítottuk elő. A kelátor Ca(II)- és Mg(II)-ionokkal képződő komplexeinek stabilitási állandóit pH-potenciometriás módszerrel határoztuk meg, azonban a Mn(II)-ion esetében relaxometriás, a Zn(II)- és Cu(II)-ionok esetében pedig spektrofotometriás módszereket kellett alkalmaznunk a stabilitási állandók meghatározására ezek nagyfokú stabilitása miatt. A $[\text{Mn}(\text{BPPA})]^+$ -komplex pMn értéke ($pMn = -\log[\text{Mn(II)}]_{\text{szabad}}$) 10,89-nak adódott, ami meghaladja az irodalomban eddig leírt összes Mn(II)-komplex pMn értékét. A $[\text{Mn}(\text{BPPA})]^+$ -komplex ^{17}O -NMR mérések alapján tartalmaz egy a fémionhoz koordinálódó vízmolekulát, amely relatíve lassú vízcsere sebességgel ($3,2 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$) jellemezhető. Ennek ellenére a $[\text{Mn}(\text{BPPA})]^+$ -kelát kifejezetten jó, 3,34 mM-os relaxivitással rendelkezik. A ligandum merev szerkezetének köszönhetően a $[\text{Mn}(\text{BPPA})]^+$ -komplex kiváló inertséggel is bír, a Cu(II)-ionnal lejátszódó kicserélődési reakcióra jellemző sebességi állandók segítségével, a pH=7,4-re extrapolált disszociációjára jellemző felezési idő 2669 órának adódott.

[1] Bonnet, C. S., Tóth, É., *CHIMIA International Journal for Chemistry*, **2016**, 70(1), 102-108.

Köszönetnyilvánítás: A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 és 134694 sz. pályázatai támogatták. Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-1 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Egy Mn(II)-alapú pH-szenzitív kontrasztanyag-jelölt fizikokémiai paramétereinek a finombeállítása ligandumtervezéssel

Madarasi Enikő,^a Zubor András,^a Kálmán Ferenc Krisztián,^a Molnár Enikő,^a Trencsényi György,^b Kiss János,^c Veres Gergő,^c Tóth Imre^a és Tircsó Gyula^a

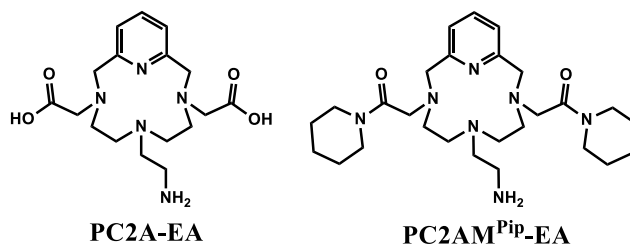
^a Debreceni Egyetem, ^aTermészettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémiai Tanszék

^b Általános Orvostudományi Kar, Orvosi Képző Intézet, Nukleáris Medicina nem önálló Tanszék

^c Klinikai Központ, Orvosi Képző Klinika, Radiológia

e-mail: madarasi.eniko@science.unideb.hu

Napjainkra megnőtt az igény olyan intelligens, úgynevezett „smart” kontrasztanyagok (SCA) iránt, amelyek segítségével nem csupán anatómiai képalkotás valósítható meg, hanem például a szövetek hőmérsékletének, a szövetekben található oxigén parciális nyomásának, különböző fémionok koncentrációjának vagy a szövetek pH-jának a változása *in vivo* körülmények között nem invazív módon. A nagy felbontással rendelkező Mágneses Rezonanciás Képző (MRI) technika egy kiváló módszer erre a célra, azonban megfelelő kontrasztanyagok előállítását igényli. A közelmúltban több Mn(II)-alapú SCA-t állítottunk elő (pl. a PC2A-EA pH-szenzitív SCA-jelölt)^[1], melyek fizikokémia paramétereinek a további javítása volt a jelen munkánk célja. A Mn(II)-kelát inertségének a javulását *tercier*-amidcsoportok alkalmazásával érték el (PC2AM^{Pip}EA, 1. ábra), amely változtatás a protonálódás hatására bekövetkező relaxivitáskülönbség ($\Delta r_{1p}=2.82$ és $\Delta r_{2p}=6.54$ mM⁻¹s⁻¹ ill.) mértékét is növelte. Ezen pozitív eredményeknek ára is volt, amit a Mn(II)-komplex stabilitásának csökkenésével fizettünk meg (pMn=7,79 vs. 8,64).



1. ábra. A PC2A-EA és a PC2AM^{Pip}EA ligandumok szerkezete.

[1] Botár, R., Molnár, E., Trencsényi, G., Kiss, J., Kálmán, F., Tircsó, G., *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*(4), 1662–1666.

Köszönetnyilvánítás: A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 és 134694 sz. pályázatai támogatták.

Ir(I)-NHC-foszfin komplex rögzítése és alkalmazása hidrogénezési reakciókban batch és áramlásos körülmények között

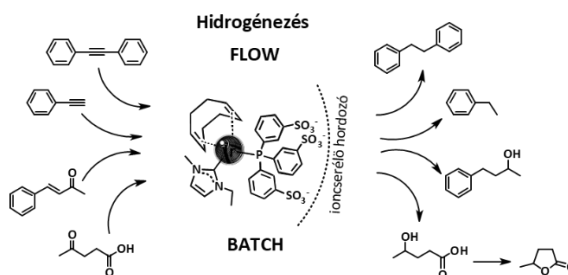
Kovács Henrietta^{a,b}, Orosz Krisztina^{a,b}, Papp Gábor^a, Joó Ferenc^{a,c}, Kathó Ágnes^a,
Horváth Henrietta^c

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^c MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen
 e-mail : henrietta.horvath@science.unideb.hu

A különféle szerves és vizes fázisú hidrogénezési reakciókban nagy katalitikus aktivitással rendelkező Na₂[Ir(cod)(emim)(mtppts)] komplexet [1-3] többféle kereskedelemben kapható ioncserélő hordozóra rögzítettük. Tanulmányoztuk a kapott heterogén komplex katalitikus aktivitását fenilacetilén, difenilacetilén, 1-hexin és benzilidénaceton hidrogénezésében mind batch reakciókban, mind H-Cube áramlásos reaktorban. Megfelelő körülmények között a katalizátor szelektív volt az alkinek alkénekké történő hidrogénezésében, és kiváló szelektivitást C = C-ben a C = O-hidrogénezéssel szemben, továbbá figyelemre méltó stabilitást mutatott. A rögzített komplex katalizálta a levulinsav gamma valerolaktonná történő hidrogénezését is.



- [1] H. Horváth, Á. Kathó, A. Udvardy, G. Papp, D. Szikszai, F. Joó: *Organometallics*, **2014**, (33), 6330-6340.
- [2] H. Horváth, G. Papp, H. Kovács, Á. Kathó, F. Joó.: *Int. J. Hydrogen Energy*, **2019**, (44) 28527-28532.
- [3] K. Orosz, G. Papp, Á. Kathó, F. Joó, H. Horváth: *Catalysts*, **2020**. (10) (1), 17.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-FK128333). A tanulmány alapjául szolgáló kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium által meghirdetett Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-04) támogatta.

A *transz,mer*-[RuCl₂(OH₂)(PTA)₃] katalitikus tulajdonságai vizes közegben (PTA=1,3,5-triaza-7-foszfadamantán)

Szolnoki Csenge Tamara^{a,b}, Marczali Orsolya^a, Kathó Ágnes^a, Horváth Henrietta^c,
Joó Ferenc^{a,c}, Papp Gábor^a, Udvardy Antal^a

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^c MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen
e-mail: udvardya@unideb.hu

Manapság az energia túlnyomó részét fosszilis energiahordozók elégetésével nyerik. E készletek azonban kimerülőben vannak, ezért egyre nagyobb az érdeklődés a megújuló energiaforrások iránt. A nap- vagy szélenergia termelése azonban szakaszos, ezért éjszakára, vagy szélcsendes időszakokra tartalékolni kell. Erre alkalmasak pl. azok a hidrogént tartalmazó vegyületek (pl. alkoholok, hidrazin, ammónia, hangyasav és sói), melyekből megfelelő katalizátor jelenlétében a H₂ közvetlenül, a felhasználás helyén felszabadítható, és azonnal felhasználható tüzelőanyagcellában elektromos áram termelésre. Majd pedig a H-tároló vegyület hidrogénezéssel ismételtén visszanyerhető. Amennyiben a rendszer telítetlen vegyületeket is tartalmaz, abban az esetben azok redukciója is lejátszódhat (H-átviteli reakció).

Munkánk során több vízoldható Ru(II)-PTA-komplexszel [1] (PTA=1,3,5-triaza-7-foszfadamantán) dehidrogéneztek a hangyasavat és a Na-formiátot.

Megállapítottuk, hogy a koordinatív telített [RuX₂(PTA)₄] (X=Cl, H) típusú vegyületek nem segítik elő a H₂ felszabadulását hangyasavból, illetve sójából. Ugyanakkor a szabad koordinációs helyet bíró *transz,mer*-[RuCl₂(OH₂)(PTA)₃] vegyület [2] aktívan dehidrogénezte a hangyasavat és Na-formiátot is vizes közegben.

[1] A. Udvardy, F. Joó, Á. Kathó, *Coord. Chem. Rev.*, **2021**, 438, 213871

[2] A. Udvardy, M. Serrano-Ruiz, V. Passarelli, E. Bolyog-Nagy, F. Joó, Á. Kathó, A. Romerosa, *Inorg. Chim. Acta.*, **2018**, 470, 82

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-FK128333). A tanulmány alapjául szolgáló kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium által meghirdetett Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-04) támogatta.

Alumínium-hidroxid alapú réteges kettős hidroxidok előállítása alkoholos szolvatáció útján

Szabados Márton^{a,b}, Szabó Vivien^{a,b}, †Pálinkó István^{a,b}, Sipos Pál^{b,c}

^a Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

^b Szegedi Tudományegyetem, Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport

^c Szegedi Tudományegyetem, Szeretlen és Analitikai kémiai Tanszék

e-mail: szabados.marton@chem.u-szeged.hu

A réteges kettős hidroxidok (angol nevük rövidítése után LDH-k) a természetben is megtalálható, de mesterséges úton is előállítható anyagásványok, melyek változatos összetételük és felhasználási lehetőségeik révén nagy népszerűsége tettek szert az elmúlt évtizedekben. Képződésük általánosságban egy kétvegyértékű fém-hidroxid alapváz módosulásával írható le, melybe egy három- vagy (ritkábban) négyvegyértékű fémion épül be izomorf szubsztitúció révén [1]. A sokkal ritkább alumínium-hidroxid alapú LDH-k esetében fordított a helyzet; az egy- és kétvegyértékű fémionok épülnek be a réteges szerkezetű anyag oktaéderes pórusaiba, így alakítva ki pozitív töltést a rétegekben és indukálva a rétegek közötti tér kialakulását [2]. A beépülő fémionok száma (Li, Mg, Co, Ni, Cu, Zn) eddig igen korlátozottnak bizonyult, meghatározó faktor az ionok mérete és hidratációs energiája.

Munkánk célja volt vizsgálni a fenti típusú LDH-k kialakulásának lehetőségét víztől eltérő közegek jelenlétében. Erre a célra egyszerű alkoholokat választottunk, melyek molekula méretük és polaritásuk miatt alkalmasak lehetnek a vizes közeg helyettesítésére a megváltozott szolvatációs energiák mellett.

A röntgendiffraktometriai vizsgálatok sikeres LDH szintézist igazoltak Ni(II) kation beépülésével, a keletkezett mintákat infravörös spektroszkópiás és termogravimetriás analízisnek vetettük alá vizsgálva az alkohol molekulák jelenlétét a mintában és kutatva a fémionok beépülésének mechanizmusát.

[1] G. D. Evans, R. C. T. Slade, *Structure and Bonding*, **2006**, 119, 1.

[2] J. R. Rees, C. S. Burden, A. M. Fogg, *Journal of Solid State Chemistry*, **2015**, 224, 36.

Köszönetnyilvánítás: A munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium és a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap ÚNKP-20-4. kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

EDTA analógok mint a gipsz kristályosodásának inhibítorai

Ziegenheim Szilveszter^{a,b}, Sztegura Alex^{a,b}, †Pálinkó István^{b,c}, Sipos Pál^{a,b}

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Szegedi Tudományegyetem, Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport

^c Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

e-mail: ziegenmheimsz@chem.u-szeged.hu

Számos ipari folyamat során okozhat nehézségeket, ha szilárd anyagok válnak ki túltelített oldataikból. A vízkő kedvezőtlenül hat a hőcserélők hatékonyságára és csökkenti a csövek keresztmetszetét, akár dugulást is okozhat. A kőolajiparban a csapadékképződés megnehezítheti a fűrést, csökkenti a besajtolás hatékonyságát. A sótlanításhoz leggyakrabban alkalmazott fordított ozmózis során a membránt eltömítve jelentősen növelheti az eljárás költségeit. Az egyik leggyakrabban képződő csapadék ezekben a folyamatokban a kalcium-szulfát-dihidrát (gipsz), emiatt igen fontos téma napjainkban is a gipsz kiválásának lassítása, megakadályozása, kontrollálása.

A szakirodalom alapján a leghatásosabb inhibitorok a több karboxilát-csoporttal rendelkező molekulák, mint például a citromsav (citrát), vagy poliakrilsav. Bár szerkezetükből adódóan az etilén-diamin-tetraecetsav (EDTA) és analógjai ígéretes inhibitorok lehetnének, az eddigiekben nem használták őket inhibitoroként ezekben a reakciókban. Ennek oka, hogy ha komplexképzéssel akarjuk akadályozni a gipsz kicsapódását, igen nagy mennyiségű adalékra lenne szükség, ami jelentősen növelné az eljárás költségeit.

Munkánk során az EDTA-t és három analógját (1,3-PDTA; 1,6-HDTA és EGTA) használtuk inhibitoroként gipsz kristályosodási reakciójában, jelentős kalcium felesleg mellett, szisztematikusan változtatva a reakcióelegy pH-ját. A reakciók lefutását vezetőképesség-méréssel követtük, valamint megvizsgáltuk az adalékok hatását a keletkező csapadékok szerkezetére (XRD) és morfológiájára (SEM). Az eredmények alapján speciális körülmények között az alkalmazott adalékok viszonylag kis mennyiségben is igen hatékonyan tudták lassítani a gipsz kristályosodását, miközben megváltozik a keletkező kristályok morfológiája is.

Ca(II)-érzékelőkben potenciálisan alkalmazható módosított BAPTA származékok Ca²⁺- és Mg²⁺-kötő sajátságai

*Tóth Annamária^a, Csomós Attila^b, Kontra Bence^b, Kovács Ervin^{b,c}, Galbács Gábor^a,
Mucsi Zoltán^b, Jancsó Attila^a*

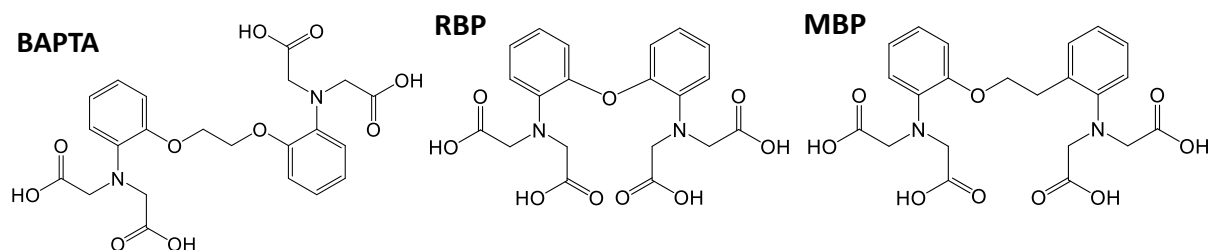
^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Femtonics Kft. Kémiai Osztály

^c TTK, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Polimerkémiai Kutatócsoport

e-mail: pankatoth97@gmail.com

Az idegkutatásokban gyakran alkalmazott fluoreszcens Ca²⁺-indikátorok jelentős hányada a fluoreszcens molekularészük mellett kelátor egységként a BAPTA-t (1,2-bisz(o-aminofenoxy)etán-N,N,N',N'-tetraecetsav), ill. annak szubsztituált származékait tartalmazza [1]. Munkánk során a BAPTA linker szakaszában módosított két származék (RBP, MBP) Ca²⁺- és Mg²⁺-ionokkal alkotott rendszereinek pH- és fémion-ligandum aránytól függő speciációs viszonyait, illetve a képződő komplexek stabilitását tanulmányoztuk, valamint hasonlítottuk össze az alap vegyület Ca²⁺- és Mg²⁺-ionokkal történő kölcsönhatásával.



A vizsgált rendszerekben kizárólag mono-komplexek képződnek, azonban a Ca²⁺, illetve a Mg²⁺ komplexek stabilitásai között, továbbá a három vegyület Ca²⁺-ion szelektivitásában is komoly különbségeket tapasztaltunk. Az egyensúlyi vizsgálatok mellett az előadásban bemutatjuk a kelátorok és tetrametil rodamin fluorofór hozzájuk történő kapcsolásával felépített érzékelő vegyületek Ca²⁺-ion affinitásával, illetve a fémionok „turn on” hatásával kapcsolatos eddigi eredményeinket is.

[1] R.Y. Tsien, *Biochemistry*, **1980**, *19*, 2396-2404.

Köszönetnyilvánítás: Femtonics Kft.

Konferencia résztvevői

név	intézmény	e-mail	előadás
Azza A. Hassoon	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék (University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry)	azza_ahmed@hotmail.com	<u>E28</u>
Balogh Bettina Diána	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	balogh.bettina@science.unideb.hu	
Bányai István	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	banyai.istvan@science.unideb.hu	<u>E13</u>
Bodnár Nikolett	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	bodnar.nikolett@science.unideb.hu	<u>E5</u>
Bombicz Petra	Természettudományi Kutatóközpont	bombicz.petra@ttk.hu	
Böszörményi Éva	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	boseva@chem.u-szeged.hu	<u>E9</u>
Buglyó Péter	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	buglyo@science.unideb.hu	E19, E27
Csupász Tibor	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	csupasz.tibor@science.unideb.hu	E16, E21, <u>E29</u> , E31, E32
Czégéni Csilla Enikő	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	nagy.csilla@science.unideb.hu	<u>E4</u>
Dömötör Orsolya	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	domotor.o@chem.u-szeged.hu	E11, E18
Enyedy Éva Anna	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	enyedy@chem.u-szeged.hu	<u>E11</u> , E18
Farkas Etelka	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	efarkas@science.unideb.hu	E27
Fábián István	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ifabian@science.unideb.hu	E1, E6
Fodor Anna Eszter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	eszter.anna.fodor@gmail.com	
Forgács Attila	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	forgacs.attila@science.unideb.hu	<u>E1</u>

54. Komplexkémiai Kollokvium

név	intézmény	e-mail	előadás
Földi-Bíró Linda	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	linda.biro@science.unideb.hu	<u>E19</u>
Gajda Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tamas.gajda@chem.u-szeged.hu	E28
Galvácsi Antal Tamás	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	galvacsi.antal@science.unideb.hu	
Garda Zoltán	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	garda.zoltan@science.unideb.hu	<u>E20</u> , E22
Grenács Ágnes	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	grenacs.agnes@science.unideb.hu	<u>E26</u>
Gyurcsik Béla	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	gyurcsik@chem.u-szeged.hu	<u>E7</u> , E8
Hajdu Bálint	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	balinth11@chem.u-szeged.hu	E7, <u>E8</u>
Horváth Dávid	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	horvath.david@science.unideb.hu	<u>E30</u>
Horváth Henrietta	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	henrietta.horvath@science.unideb.hu	E2, E3, E4, <u>E35</u> , E36
Jakusch Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jakusch@chem.u-szeged.hu	<u>E12</u>
Jancsó Attila	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jancso@chem.u-szeged.hu	E39
Joó Ferenc	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	joo.ferenc@science.unideb.hu	E2, E3, E4, E35, E36
Kaizer József	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	kaizer@almos.vein.hu	
Kathó Ágnes	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	katho.agnes@science.unideb.hu	E2, E3, E4, E35, E36
Kastal Zsuzsa	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kastal.zsuzsa@science.unideb.hu	

név	intézmény	e-mail	előadás
Kállay Csilla	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kallay.csilla@science.unideb.hu	E5
Kálmán Ferenc Krisztián	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	kalman.ferenc@science.unideb.hu	E20, E21, <u>E31</u> , E32, E33, E34
Kása Zsolt	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kasa.zsolt@chem.u-szeged.hu	E9, <u>E10</u>
Kiss Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tkiss@chem.u-szeged.hu	E12
Lakatos Gergő	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	99lakatosgergo@gmail.com	<u>E21</u>
Lente Gábor	Pécsi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék	lente@gamma.ttk.pte.hu	
Lihi Norbert	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	lihi.norbert@science.unideb.hu	E1, <u>E6</u> , E31
Madarasi Enikő	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	madarasi.eniko@science.unideb.hu	E20, E21, E22, E33, <u>E34</u>
Marozsán Natália	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	marozsan.natalia@science.unideb.hu	<u>E2</u> , E3
May Nóra Veronika	Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ	may.nora@ttk.hu	E1, E6, E11, E18, <u>E25</u>
Mészáros János Péter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	meszaros.janos@chem.u-szeged.hu	E18
Nagy Antónia	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	antonia.antonia8@gmail.com	E31, <u>E32</u>
Nagy Sándor	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	nagy.sandor@science.unideb.hu	<u>E27</u>
Orosz Krisztina	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	orosz.krisztina@science.unideb.hu	E2, <u>E3</u> , E35,
Ősz Katalin	Pécsi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék	oszk@gamma.ttk.pte.hu	
Papp Gábor	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	papp.gabor@science.unideb.hu	E2, E3, E4, E35, E36

54. Komplexkémiai Kollokvium

név	intézmény	e-mail	előadás
Pivarcsik Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	pivarcsik.tamas@gmail.com	<u>E18</u>
Purgel Mihály	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	purgel.mihaly@science.unideb.hu	E15, E16
Sajtos Gergő Zoltán	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	sajtosgeri@gmail.com	<u>E33</u>
Sipos Pál	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	sipos@chem.u-szeged.hu	E9, E10, E37, E38
Sóvágó Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	sovago@science.unideb.hu	
Szabados Márton	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szabados12m@gmail.com	E10, <u>E37</u>
Szabó Vivien	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szabovivien95@gmail.com	E37
Szalontai Gábor	Pannon Egyetem	szalontai.gabor@icloud.com	<u>E24</u>
Székely Enikő	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szekely.eniko@science.unideb.hu	
Szigyártó Imola Csilla	Természettudományi Kutatóközpont	szigyarto.imola.csilla@ttk.hu	
Szolnoki Csenge Tamara	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	szolnokicsenge@science.unideb.hu	E36
Szorcsik Attila	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szorcsik@chem.u-szeged.hu	E28
Szücs Dániel	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	szucsdaniel94@gmail.com	<u>E17</u>
Tatsiana V. Petrasheuskaya	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék (University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry)	petrashevtanya@chem.u-szeged.hu	E11
Timári István	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	timari.istvan@science.unideb.hu	<u>E23</u>

Konferencia résztvevői

név	intézmény	e-mail	előadás
Tircsó Gyula	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	gyula.tircso@science.unideb.hu	<u>E15</u> , E20-E22, E29-E34
Tóth Annamária	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	pankatoth97@gmail.com	<u>E39</u>
Tóth Éva	Centre de Biophysique Moléculaire, Orléans	eva.jakabtoth@cnrs-orleans.fr	<u>E14</u>
Tóth Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	imre.toth@science.unideb.hu	<u>E16</u> , E17, E22, E30, E34
Udvardy Antal	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	udvardya@unideb.hu	E2, E3, E4, <u>E36</u>
Várad Balázs	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varadi.balazs@science.unideb.hu	E15, <u>E22</u> , E33
Várnagy Katalin	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varnagy.katalin@science.unideb.hu	E26
Zeyad Hasan Abdullah Nafae	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék (University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry)	ziegenheimsz@chem.u-szeged.hu	
Ziegenheim Szilveszter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ziegenheimsz@chem.u-szeged.hu	<u>E38</u>