



**Magyar Tudományos
Akadémia**

Magyar Tudományos Akadémia

KOORDINÁCIÓS KÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

*Munkabizottsági ülés: 2021. december 3., Szeged, MTA
SZAB székháza*

„LENDÜLETBEN, SZEGEDEN”

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

A Koordinációs Kémiai Munkabizottság idei második ülésére 2021. december 3.-án kerül sor „Lendületben, Szegeden” címmel, melyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülésnek a Magyar Tudományos Akadémia Szegedi Területi Bizottság székháza (6720 Szeged, Somogyi u. 7., Telefon: +36 62 553 910, E-mail: szab@tab.mta.hu) ad otthont, amelyet a szokásos formájában (személyes jelenléttel) tervezünk megrendezni. Felhívjuk a figyelmét arra, hogy az MTA SZAB székház kizárólag védettségi igazolvány birtokában látogatható, az épületen belül pedig javasolt a maszkhasználat.

Talán egyetértene velünk abban, hogy a jelenlegi helyzetben nagyon nehéz tervezni (különösen a jövő tekintetében igaz ez), ezért amennyiben a járványügyi szabályok úgy alakulnak, előfordulhat, hogy az ülést virtuális platformra helyezzük át. Ezért arra kérjük Önöket, hogy a részvételi szándékukat legkésőbb 2021. november 29.-ig jelezzék egy külön e-mailban megküldött link segítségével, mert csak ebben az esetben tudjuk garantálni az on-line ülés eléréshez szükséges link e-mailben történő megküldését.

A decemberi viszontlátás reményében tisztelettel,

Dr. Enyedy Éva Anna, a Munkabizottság elnöke és *Dr. Tircsó Gyula*, a Munkabizottság titkára

Program

10.30 Megnyitó

Enyedy Éva Anna a Munkabizottság elnöke (Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék).

10.35 **Kukovecz Ákos, intézetvezető** (Szegedi Tudományegyetem, Kémiai Intézet)

A szegedi Kémiai Intézet bemutatása

10.45 **Szilágyi István** (Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, SZTE-MTA Lendület Biokolloidok Kutatócsoport)

Nanorészecske alapú kompozitok az oxidatív stressz ellen

11.10 **Ungor Ditta^{a,b}, Ahmed Mohsen Ismail^c, Gombár Gyöngyi^b, Béltéki Rita^b, Csapó Edit^{a,b}** (a: MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, ÁOK, Orvosi Vegytani Intézet; b: MTA-SZTE Lendület Nemesfém Nanoszerkezetek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, TTIK, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék; c: Szegedi Tudományegyetem, TTIK, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)

Nemesfém nanoszerkezetek: az előállításától az alkalmazásokig

11.20 **Ungor Ditta^{a,b}, Csapó Edit^{a,b}** (a: MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, ÁOK, Orvosi Vegytani Intézet; b: MTA-SZTE Lendület Nemesfém

Nanoszerkezetek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, TTIK, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)

Fluoreszcens nemesfémek, mint potenciális optikai bioszenzorok

- 11.40 **Enyedy Éva A.** (Szegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék)

Funkcionális fémkomplexek biospeciációja

- 11.50 **Pósa Vivien^a, Julia H. Bormio Nunes^b, Bernhard K. Keppler^b, Christian R. Kowol^b, May Nóra V.^c, Petra Heffeter^d, Enyedy Éva A.^a** (a: Szegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék; b: Institute of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Vienna, Austria, c: Természettudományi Kutatóközpont, Szervezetkutató Központ, ELKH TTK, Budapest, d: Institute of Cancer Research, Medical University of Vienna, Austria)

A COTI-2 tioszemikarbazon és származékainak endogén fémionokkal való kölcsönhatásának oldatkémiai vizsgálata

- 12.15 **Ebéd**

- 13.15 **Intézetlátogatás** (on-line megrendezés esetén elmarad, azonban ebben az esetben a „Lendület kutatók” + 5 percben bemutatják az általuk beszerzett infrastruktúrát)

- 14.15 **May Nóra V.** (Szervezetkutató Központ, Természettudományi Kutatóközpont, ELKH TTK).
ESR spektroszkópia alkalmazása paramágneses fémkomplexek oldategyensúlyi vizsgálatában

- 14.40 **Bonczidai-Kelemen Dóra^a, Diószegi Róbert^a, May Nóra V.^b, Fábíán István^a, Lihi Norbert^a** (a: Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem; b: Szervezetkutató Központ, Természettudományi Kutatóközpont, ELKH TTK).
Szuperoxid dízmutázok és modellvegyületeik

- 15.05 **Földi-Bíró Linda, Barna Viktória, Molnár Adrienn, Buglyó Péter, Farkas Etelka** (Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem).
Ru(II) és Rh(III) félszendvics kationokhoz kapcsolódó kelátorok elemzése várhatóan fotoaktiválható vegyületek kifejlesztéséhez

- 15.30 **Kéri Mónika** (Fizikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem).
NMR alkalmazások másképpen

- 15.55 Elnöki zárszó

Enyedy Éva Anna a Munkabizottság elnöke (Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék).

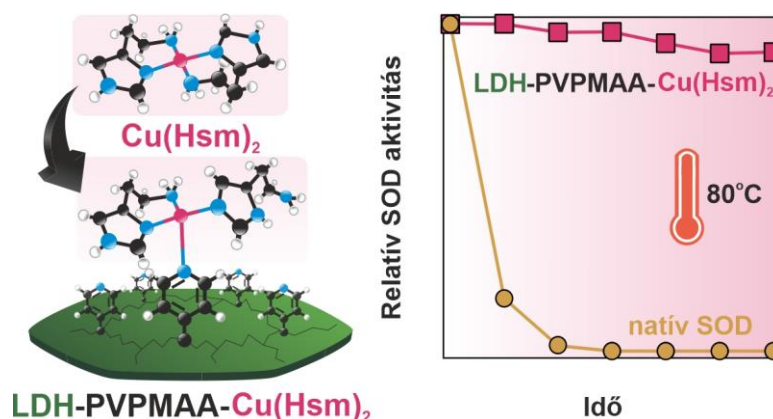
Nanorészecske alapú kompozitok az oxidatív stressz ellen

Szilágyi István

SZTE-MTA Lendület Biokolloidok Kutatócsoport, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék,
Szegedi Tudományegyetem

Az előadó e-mail címe: szistvan@chem.u-szeged.hu

Endogén és exogén eredetű antioxidánsok fontos szerepet töltenek be a reaktív oxigén intermedierek által indukált oxidatív stressz csökkentésében. Orvosbiológiai és ipar alkalmazásuk azonban számos akadályba ütközik környezeti hatásokra való érzékenyséjük, illetve szerkezeti és funkcionális instabilitásuk miatt. Az előadás során olyan nanorészecske alapú antioxidáns rendszerek kerülnek ismertetésre, amelyek a természetes antioxidánsok limitált alkalmazhatóságának kiküszöbölésére, illetve azok helyettesítésének érdekében kerültek kifejlesztésre: immobilizált enzimek [1,2], antioxidáns hatású nanorészecskék [3,4] és enzimutánzó fémkomplex tartalmú nanokompozitok [5,6] (1. ábra).



1. ábra Bal oldal: kopolimer funkcionális réteges kettős hidroxid (LDH-PVPMAA) részecskékre rögzített réz(II)-hisztamin (Cu(Hsm)_2) komplex sematikus ábrázolása. Jobb oldal: a nanokompozit és a természetes szuperoxid dizmutáz (SOD) enzim időfüggő aktivitása magas hőmérsékleten [6].

Köszönetnyilvánítás: Köszönjük az MTA, ELKH, NKFIH, GINOP és az SNSF támogatását.

Irodalom

- [1] Saringer, S.; Rouster, P.; Szilágyi, I., *J. Colloid Interface Sci.* **2021**, 590, 28-37.
- [2] Pavlovic, M.; Murath, S.; Katona, X.; Alsharif, N. B.; Rouster, P.; Maleth, J.; Szilágyi, I., *Sci Rep* **2021**, 11, 4321.
- [3] Alsharif, N. B.; Bere, K.; Saringer, S.; Samu, G. F.; Takacs, D.; Hornok, V.; Szilágyi, I., *J. Mat. Chem. B* **2021**, 9, 4929-4940.
- [4] Alsharif, N. B.; Samu, G. F.; Saringer, S.; Muráth, S.; Szilágyi, I., *J. Mol. Liq.* **2020**, 309, 113066.
- [5] Somosi, Z.; May, N. V.; Sebok, D.; Palinko, I.; Szilágyi, I., *Dalton Trans.* **2021**, 50, 2426-2435.
- [6] Pavlovic, M.; Nafradi, M.; Rouster, P.; Murath, S.; Szilágyi, I., *J. Colloid Interface Sci.* **2019**, 543, 174-182.

Nemesfém nanoszerkezetek: az előállítástól az alkalmazásokig

Ungor Ditta^{a,b}, Ahmed Mohsen Ismail^c, Gombár Gyöngyi^b, Béltéki Rita^b, Csapó Edit^{a,b}

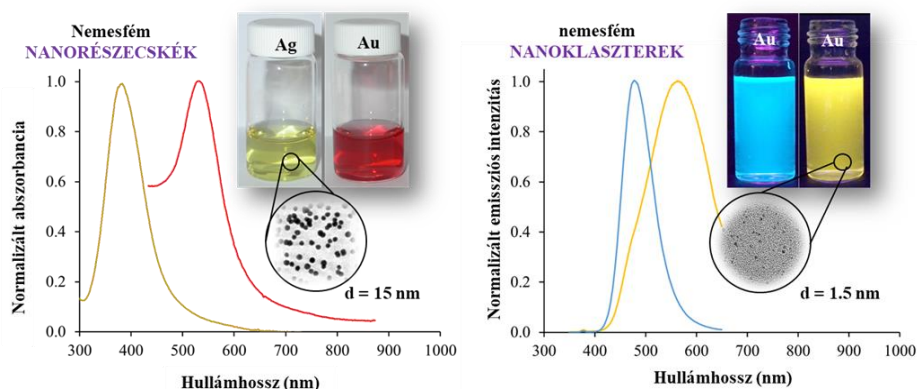
^a MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, ÁOK, Orvosi Vegytani Intézet

^b MTA-SZTE Lendület Nemesfém Nanoszerkezetek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, TTIK, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

^c Szegedi Tudományegyetem, TTIK, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Az előadó e-mail címe: juhaszne@chem.u-szeged.hu; juhaszne.csapo.edit@med.u-szeged.hu

A 21. századi nanotechnológiai fejlesztések kulcsfontosságú elemei a nanorészecskék. A sokféle típusú részecske közül a nemesfém nanorészecskék és nanoklaszterek, mint az arany, ezüst és a réz rendelkeznek méretükkel, morfológiájukkal és összetételükkel hangolható, optikai, elektromos és mágneses tulajdonsággal, melyek nagyban szabályozhatóak az előállításuk, tisztításuk és jellemzésük révén. Kismértékű változás a méretben/morfológiában jelentős hatással bír ezen tulajdonságokra, így szabályozható mérettel, eloszlással és szerkezettel rendelkező részecskék/klaszterek előállításához precíz kivitelezésű és reprodukálható szintézisek kidolgozására folyamatos igény van. Előadásomban összefoglalni kívánom, hogy az elmúlt 10 évben döntően milyen típusú nemesfém nanoszerkezetek előállítását és szerkezetvizsgálatát valósítottuk meg főként (elektro)katalizátorok [1,2] és optikai bioszenzorok [3,4] tervezéséhez. Mindezek mellett kiemelten azt is szeretném bemutatni, hogy milyen ígéretes lehetőségek rejlenek ezen plazmonikus vagy fluoreszcens tulajdonsággal rendelkező nemesfém-tartalmú nanoszerkezetű anyagok alkalmazásában gyógyszer-technológiai és orvosi biológiai területeken.



1. ábra Nemesfém nanoszerkezetek (nanorészecskék és nanoklaszterek) optikai tulajdonságai

Köszönetnyilvánítás: A kutatási munkát a MTA Lendület programja és a FK116323 projekt támogatja.

Irodalom

- [1] A. M. Ismail, et al., *ACS Energy Letters*, **2019**, 4, 48.
- [2] A. M. Ismail, et al., *ACS Catalysis*, **2020**, 10, 5681.
- [3] D. Ungor, et al., *Sensors and Actuators, B*, **2019**, 288, 728.
- [4] D. Ungor, et al., *Journal of Molecular Liquids*, **2021**, 338, 116695.

Fluoreszcens nemesfémek, mint potenciális optikai bioszenzorok

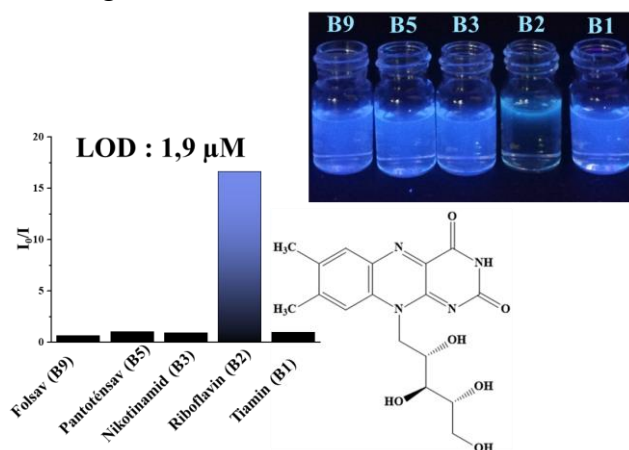
Ungor Ditta^{a,b}, Csapó Edit^{a,b}

^a MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, ÁOK, Orvosi Vegytani Intézet

^b MTA-SZTE Lendület Nemesfém Nanoszerkezetek Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, TTIK, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Az előadó e-mail címe: ungord@chem.u-szeged.hu, ungorditta@gmail.com

Az elmúlt néhány évtizedben a nanoszerkezetű anyagok előállítása és szerkezetvizsgálata, számos tudományterületen való alkalmazhatóságuknak köszönhetően, az egyik legdinamikusabban fejlődő kutatási területté vált. Különösen a nemesfémek azok, amelyek a tömbfázishoz képesti méretcsökkenés hatására megnövekedett reaktivitásuk és az újonnan megjelenő, egyedi elektromos, mágneses és optikai tulajdonságaiknak köszönhetően az elektronikától a katalízisen át a gyógyászatig számos tématerületen alkalmazhatóak. Az ún. „zöldkémiai” úton előállított nemesfém klaszterek kiemelkedően jó kinetikai stabilitást mutatnak fiziológiás közegben. Szerkezetükkel hangolható fluoreszcenciával és nagy kvantumhasznosítási tényezővel rendelkeznek, ami lehetővé teszi fluoreszcens bioszenzorok alapjaiként történő hasznosításukat. Előadásom keretén belül ilyen egy- és kétfémes nanoklasztereken alapuló optikai érzékelőrendszereket szeretnék ismertetni, melyeket fémionok és különféle neuroaktív molekulák kimutatására használtunk fel. A standard folyadék fázisú mérések mellett, két esetben papír alapú „cseppentéses” gyors tesztek fejlesztését is megvalósítottuk, melyek a későbbiekben nagymértékben elősegíthetik új és innovatív klinikai tesztek kidolgozását.



1. ábra AMP-Cu nanoklaszter, mint potenciális riboflavin optikai bioszenzor

Köszönetnyilvánítás: A kutatási munkát a MTA Lendület programja és a PD137938 projekt támogatja.

Irodalom

- [1] D. Ungor, et al., *Coll Surf B*, 155 (2017) 135-141.
- [2] D. Ungor, et al., *Sensors and Actuators, B*, 288 (2019) 728-733.
- [3] D. Ungor, et al., *Journal of Molecular Liquids*, 338 (2021) 116695.

Funkcionális fémkomplexek biospeciációja

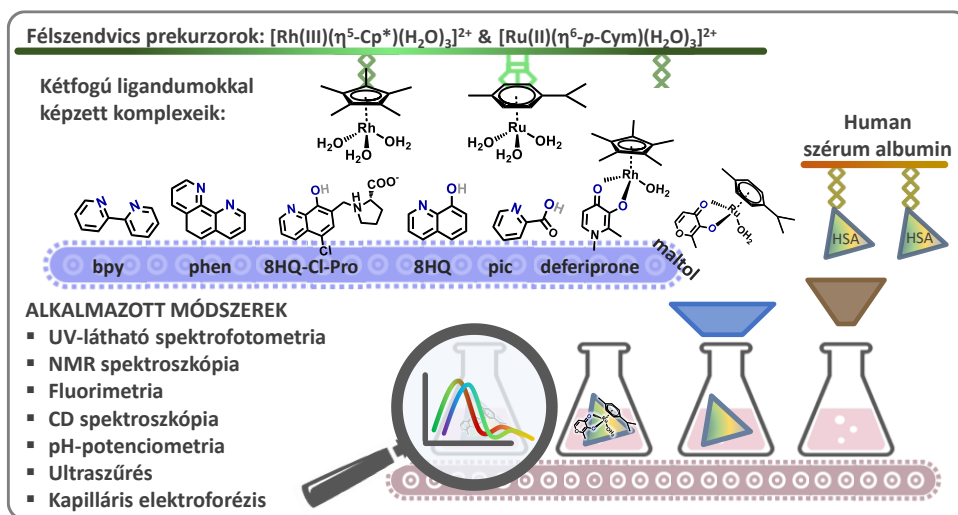
Enyedy Éva A.

MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Szervetlen és Analitikai Kémiai

Tanszék, Szegedi Tudományegyetem

Az előadó e-mail címe: enyedy@chem.u-szeged.hu

A kemoterápiás kezelések során fellépő mellékhatások és gyógyszerrezisztencia egyértelműen motiválják olyan új vegyületek kifejlesztését, amelyek nemcsak megfelelően hatékonyak, hanem szelektívek és alacsony szisztémás toxicitást okoznak. A racionális gyógyszerfejlesztési folyamathoz, különösen fémkomplexek esetén, meg kell értenünk a vegyületek farmakológiai hatását befolyásoló tényezőket. Ehhez a kémiai szerkezet ismerete mellett szükséges a vegyületek biológiai folyadékokban történő (bio)transzformációs folyamatainak feltárása, hogy közelebb kerüljünk a farmakokinetikai tulajdonságaik és a hatásmechanizmusuk megértéséhez. A 2019-től működő kutatócsoportunk célja, korábbi munkáink folytatásaként, új rákellenes fémkomplexek (pl. Ru, Rh, Cu) és endogén fémionokkal komplexeket képző nemfémes vegyületek (pl. 8-hidroxi-kinolinok, tioszemikarbazonok, különböző hibridmolekulák) kifejlesztése és azok széleskörű vizsgálata különös tekintettel oldatkémiai és redoxi tulajdonságaikra, szérumszuszpenzióval és azonosított, ill. feltételezett target makromolekulákkal való kölcsönhatásukra. Fontosnak tartjuk a szerkezet, a kapott termodinamikai/kinetikai adatok, a redoxi aktivitás, a biológiai makromolekulákkal való kölcsönhatások, a krisztallográfiai adatok és a biológiai hatás közötti összefüggések feltárását. Előadásomban meg szeretném mutatni kutatási irányainkat, az alkalmazott módszereket és az eddig kapott legfontosabb eredményeinket.



1. ábra Félszendvics fémorganikus komplexek biospeciációs vizsgálata

Köszönetnyilvánítás: Lendület program (LP2019-6/2019) és OTKA K124240.

A COTI-2 tioszemikarbazon és származékainak endogén fémionokkal való kölcsönhatásának oldatkémiai vizsgálata

Pósa Vivien^a, Julia H. Bormio Nunes^b, Bernhard K. Keppler^b, Christian R. Kowol^b, May Nóra V.^c, Petra Heffeter^d, Enyedy Éva A^a

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

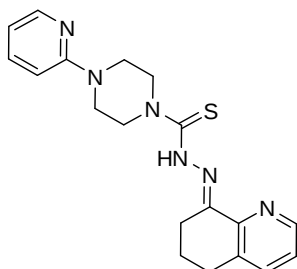
^b Institute of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Vienna, Austria

^c Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ, ELKH TTK, Budapest

^d Institute of Cancer Research, Medical University of Vienna, Austria

Az előadó e-mail címe: posa.vivien@chem.u-szeged.hu

Az α -N-heterociklusos tioszemikarbazonok (TSK-ok) rákellenes hatása szorosan összefügg endogén fémionokkal, például vas- és rézionokkal való komplexképzésükkel [1,2]. Legismertebb képviselőjük, a triapin, mely a vastartalmú ribonukleotid reduktáz enzim inhibícióján keresztül fejti ki hatását [1]. Számos klinikai fázis I. és II. vizsgálatban tesztelték már, azonban alkalmazása számos mellékhatással jár [1], ami további vegyületek fejlesztését ösztönözte. A COTI-2 (1. ábra) kódnevű TSK-nal 2015 óta folynak klinikai vizsgálatok [3],



1. ábra A COTI-2 szerkezeti képlete

és bár a triapintól eltérő hatásmechanizmust javasoltak, ez a vegyület is kölcsönhatásba képes lépni endogén fémionokkal. Korábbi eredményeink alapján fontos szerepe van a rezisztens rákos sejtekkel szemben mutatott aktivitásban a képződő rézkomplexek redoxi tulajdonságának és a glutationnal szemben mutatott reaktivitásnak [4]. Előadásomban a COTI-2 és három különböző módon szubsztituált származékának oldatkémiai jellemzését és a réz(II)-, vas(II)-, vas(III)- és cink(II)ionokkal való komplexképzésükre vonatkozó eredményeinket mutatom be, a vonatkozó legfontosabb biológiai aktivitás adatokkal együtt.

Köszönetnyilvánítás: Lendület program (LP2019-6/2019), OTKA K124240, Magyar-Osziptrák Kétoldalú Tudományos és Technológiai Együttműködés 2019-2.1.11-TÉT-2019-00003.

Irodalom

[1] Kunos, A.; Chu, E.; Beumer, J.H.; Sznol, M.; Ivy, S.P., *Cancer Chemother. Pharmacol.* **2017**, 79, 201-207.

[1] Heffeter, P.; Pape, V.F.S.; Enyedy, É.A.; Keppler, B.K.; Szakacs, G.; Kowol, C.R., *Antioxid. Redox Signal.* **2019**, 30, 1062-1082.

[2] <https://clinicaltrials.gov/ct2/show/NCT02433626>

[3] Bormio Nunes, J.H.; Hager, S.; Mathuber, M.; Pósa, V.; Roller, A.; Enyedy, É.A.; Stefanelli, A.; Berger, W.; Keppler, B.K.; Heffeter, P.; Kowol C.R., *J. Med. Chem.* **2020**, 63, 13719-13732.

ESR spektroszkópia alkalmazása paramágneses fémkomplexek oldategyensúlyi vizsgálatában

May Nóra V.

Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ, ELKH TTK, Budapest

Az előadó e-mail címe: may.nora@ttk.hu

Paramágneses fémkomplexeket egyre nagyobb számban alkalmaznak a klinikai gyakorlatban, például radioterápiában, kontrasztanyagként orvosi képalkotó vizsgálatokban, de felmerülnek rákellenes szerek fejlesztésében is, valamint in vivo képződnek a kelátterápia során (a fémfelhalmozódással járó betegségek gyógyításában). A fémtartalmú enzimek biológiai rendszerekben számos folyamatot katalizálnak, amelyek modell vegyületeken keresztül történő megismerése új típusú katalizátorok kifejlesztését segíthetik. Mindezen területeken egyre nagyobb igény mutatkozik a szerkezetek, a fizikai-kémiai tulajdonságok és a funkcionalitás (katalitikus vagy biológiai aktivitás) közötti összefüggések megértésére. Az elektronspin rezonancia (ESR) spektroszkópia különösen értékes módszer lehet paramágneses fémkomplexek oldatban lévő szerkezetének vizsgálatára, mivel ez a technika rendkívül érzékeny a párosítatlan elektron kémiai környezetére.

Ebben az előadásban, néhány példán keresztül bemutatjuk, hogy az ESR spektroszkópiai módszert az elmúlt 20 évben milyen koordinációs kémiai kutatásokban alkalmaztuk és milyen szerkezeti vagy termodinamikai információt nyerhetünk vele. Megfelelő körülmények között alkalmas lehet képződési állandók meghatározására, szerkezeti izomerek és oligomerek kimutatására, redox folyamatok követésére. A fenti alkalmazások elindítása Magyarországon elsősorban Plánkáné dr. Szabó Terézia nevéhez fűződik, a spektrumokban rejlő információk kinyeréséhez elengedhetetlen számítógépes programokat (epr^1 és $2d_epr^2$) pedig Prof. Rockenbauer Antal fejlesztette ki.

Köszönetnyilvánítás: Köszönöm a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal OTKA FK 124240 valamint K 124544 pályázatainak.

Irodalom

[1] Rockenbauer A., Korecz L., *Appl. Magn. Reson.* **1996**, *10*, 29-43

[2] Rockenbauer A., Szabó-Plánka T., Árkosi Zs., Korecz L., *J. Am. Chem. Soc.*, **2001**, *123*, 7646-7654

Szuperoxid dizmutázok és modellvegyületeik

Bonczidai-Kelemen Dóra ^a, Diószegi Róbert ^a, May Nóra V. ^b, Fábián István ^a, Lihi Norbert ^a

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

^b Szerkezetkutató Központ, Természettudományi Kutatóközpont, ELKH TTK, Budapest

Az előadó e-mail címe: lihi.norbert@science.unideb.hu

A szuperoxid dizmutáz (SOD) enzimek a szervezetben képződő szuperoxid gyökanion lebontásáért felelőek. Habár az enzim igen hatékonyan távolítja el a szuperoxid aniont az élő szervezetből, kóros esetekben mennyisége lecsökkenhet és a megnövekedett szuperoxid koncentráció a DNS károsodását és sejthalált idézhet elő. A SOD enzimek közös jellemzője, hogy aktív centrumukban valamilyen könnyen vegyértékváltó fémiont tartalmaznak, amely oxidált és redukált formája közötti egyelektronos átmenet katalizálja a szuperoxid gyökanion bomlását.¹

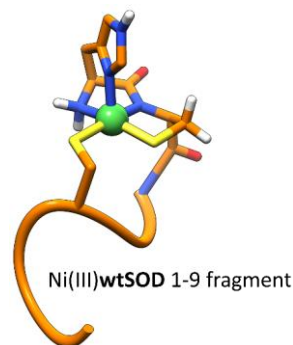
Az előadásban bemutatjuk az utóbbi években Kutatócsoportunkban intenzíven vizsgált nikkel iont tartalmazó SOD enzim natív fragmensének és megfelelően választott modellvegyületeinek koordinációs és SOD aktivitás vizsgálatát, valamint a csoportban alkalmazott SOD aktivitás mérési módszert, amely új perspektívát mutat fémion katalizált dizmutálási reakciók kinetikai vizsgálatában.^{2,3}

Ezen túlmenően olyan új, piridin alapvázú ligandumok réz(II)-komplexeit is bemutatjuk, amelyek megfelelő finomhangolás után alkalmasak lehetnek a szervezetben SOD enzimek funkcionális modelljeként szolgálni és betölteni azok szerepét az enzim lecsökkent koncentrációja esetén.

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönettel tartoznak az NKFIH K-124983 és PD-128326 sz. pályázataikért. A munka az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-21-4-II kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

Irodalom

- [1] Y. Sheng, I. A. Abreu, D. E. Cabelli, M. J. Maroney, A.-F. Miller, M. Teixeira, J. S. Valentine, *Chem. Rev.*, **2014**, *114*(7), 3854-3918.
- [2] D. Kelemen, N. V. May, M. Andrási, A. Gáspár, I. Fábián, N. Lihi, *Chem. Eur. J.*, **2020**, *26*(70), 16767-16773.
- [3] D. Bonczidai-Kelemen, G. Sciortino, N. V. May, E. Garribba, I. Fábián, N. Lihi, *Inorg. Chem. Front.*, **2021**, közlésre elfogadva.



1. ábra A NiSOD enzim katalitikusan aktív részletének szerkezete.

Ru(II) és Rh(III) félszendvics kationokhoz kapcsolódó kelátorok elemzése várhatóan fotoaktiválható vegyületek kifejlesztéséhez

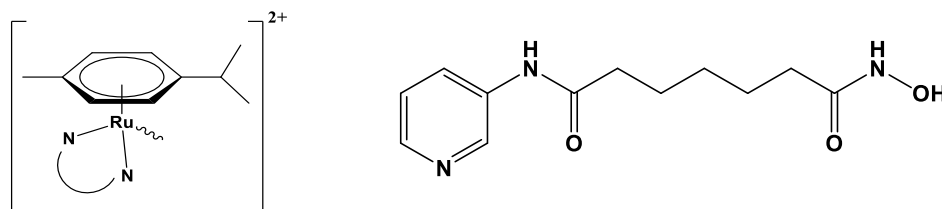
Földi-Bíró Linda, Barna Viktória, Molnár Adrienn, Buglyó Péter, Farkas Etelka

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, Debrecen, Magyarország

Az előadó e-mail címe: linda.biro@science.unideb.hu

Az utóbbi években a kemoterápiás kezelések mellékhatásainak csökkentése érdekében egyre nagyobb érdeklődés mutatkozik az ún. PACT-vegyületek (photoactivated chemotherapy), melyek kizárólag fénnel való kölcsönhatásuk révén fejtik ki biológiai hatásukat, fény távollétében inaktívak. Hangolható szerkezeti sajátágaiknak köszönhetően a félszendvics szerkezetű Ru(II) komplexek ígéretesnek mutatkoznak ezen a területen. [1]

Az effektivitás növelése érdekében célunk olyan, két különböző hatásmechanizmusú, biológiailag aktív molekulát/molekularészletet tartalmazó vegyületek előállítása, melyek fotokémiai aktiválás útján kettős citotoxikus hatást válthatnak ki. Ehhez olyan, kinetikailag inert félszendvics Ru(II) vegyületek előállítását tervezzük, melyekben a zongoraszék geometriájú fémion két koordinációs helyét egy (N,N) kelátor, míg a harmadik helyet a napjainkban a bőrrák egyik típusának kezelésére alkalmazott SAHA (suberoylanilide hydroxamic acid) piridin-származéka foglalja el (1. ábra).



1. ábra: A $[(\eta^6\text{-}p\text{-cym})\text{Ru}(\text{N,N})]^{2+}$ komplexek általános szerkezete és a py-SAHA szerkezeti képlete.

A tervezett cél elérése érdekében a munka két irányban folyik: az egyik irányvonal a komplexek szintézisét és a fotokémiai aktiválás paramétereinek felderítését jelenti, míg a másik irányvonal fókuszában a rendelkezésre álló oldategyensúlyi eredmények alapján a különböző ligandumok adott körülmények közötti fémion-megkötésének elemzése áll, mely eredmények fontos szerepet tölthetnek be a fotoaktiválásra alkalmas vegyületek kifejlesztésében. Az előadás a munka jelenlegi fázisát mutatja be.

Irodalom

[1] S. Betanzos-Lara, L. Salassa, A. Habtemariam, O. Novakova, A. M. Pizarro, G. J. Clarkson, B. Liskova, V. Brabec, P. J. Sadler, *Organometallics*, **2012**, 31, 3466-3479.

NMR alkalmazások másképpen

Kéri Mónika

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

Az előadó e-mail címe: kerimonika@science.unideb.hu

A nagy felbontású folyadékfázisú mágneses magrezonanciás (NMR) spektroszkópia a hagyományosnak mondható szerkezetvizsgálat mellett alkalmazható molekulák reverzibilis diffúziójának mérésére és relaxációs tulajdonságainak vizsgálatára is [1], mely többlet információt szolgáltat a kémiai kölcsönhatások jellemzéséhez, makromolekulák hidratációjának, kis molekulákkal való kölcsönhatásának leírásához.[2] Egyre nagyobb teret hódít a kis felbontású NMR, amellyel a közegen keresztül a rendszeren belüli kölcsönhatásokat vizsgálhatjuk. A kis és nagyterű NMR technikák jól kombinálhatóak porózus szilárd anyagok karakterizálása során, ahol a pórusokat részben vagy teljesen kitöltő folyadék protonjait vizsgáljuk, és a szilárd közeg morfológiájára, folyékony közeggel való kölcsönhatására kapunk információt. A folyadék molekuláinak transzverzális relaxációs időállandója nagy mértékben függ a molekula rotációs-korrelációs idejétől, így megfigyelhetők a felületi csoportokhoz koordinált, vagy a pórusokat kitöltő nagyobb mobilitású molekulák. Pórusos közegben meghatározható a folyadékmolekulák mozgásának sebessége és típusa, míg félig telt pórusok esetén gözdiffúzió figyelhető meg. Nem szokványos technika az NMR krioporozimetria, amely azon a jelenségen alapszik, hogy a pórusokba zárt folyadék termodinamikai fázisátmeneti hőmérséklete függ a pórus méretétől és alakjától, így a fagyás- és olvadásgörbékből pórusméreteloszlás számolható.[3]

Az előadás példákon keresztül mutatja be az említett technikák lehetőségeit makromolekulás polielektrolitok (PAMAM dendrimerek,) fizikai-kémiai tulajdonságainak vizsgálatára, és változatos porózus rendszerek (szén aerogélek, közetek) szilárd-folyékony határfelületi tulajdonságainak leírására az alkalmazás körülményei között.[4]

Köszönetnyilvánítás: A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal – NKFIH (K-13198, PD-135169) támogatja.

Irodalom

[1] Kimmich R., *Springer* **2019**, ISBN: 3-540-61822-9.

[2] Kéri, M.; Peng, C.; Shi X.; Bányai I., *J. Phys. Chem. B* **2015**, 119 (7), 3312-3319.

[3] Keri, M.; Nagy, B.; László, K.; Bányai, I., *Micropor. Mesopor. Mat.* **2021**, 317, 110988.

[4] Keri, M.; Nagy, Z.; Novak, L.; et al., *PCCP* **2017**, 19 (18), 11540-11548.