

# **55. Komplexkémiái Kollokvium**

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

**2022. május 25-27., Debrecen**



# **Részletes program**



## MÁJUS 25. (SZERDA)

Elnök: Várnagy Katalin (DE)

14:00 – 14:10 Megnyitó: Várnagy Katalin (DE), a Komplexkémiai Szakcsoport elnöke.

14:10-14:30 **E1** Balogh Ria, Gyurcsik Béla, Mikael Jensen, Peter W. Thulstrup, Ulli Köster, Niels J. Christensen, Marianne L. Jensen, Hunyadi-Gulyás Éva, Lars Hemmingsen, Jancsó Attila (SzTE): **A CueR fémszabályzó fehérje C-terminális CCHHRAG fragmensének szerepe a fémionkötőhely stabilizálásában**

14:30-14:50 **E2** Tóth Annamária, Sajdik Kadosa, Gyurcsik Béla, Kele Zoltánb Weber Edit, Szekeres Levente István, Peter W. Thulstrup, Lars Hemmingsen, Juliana Schell, Jancsó Attila (SzTE): **Az As(III) és Hg(II) kölcsönhatása az AfArsR fémszabályzó fehérje félfémkötő szakaszát modellező oligopeptiddel**

14:50-15:10 **E3** Böszörményi Éva, Kutus Bence, Dömötör Orsolya, Peintler Gábor, Sipos Pál (SzTE): **Terner kalcium – neodímium – glükonát rendszert leíró kémiai modell meghatározása**

15:10-15:30 **E4** Kása Eszter, Szabó Yvette, Szabados Márton, Kutus Bence, Bellahsen Naoufal, Sipos Pál (SzTE): **A trikalcium-aluminát előállítása ipari körülmények között és semlegesítési folyamatainak feltérképezése**

15:30-16:00 *Szünet*

Elnök: Sipos Pál (SzTE)

16:00-16:20 **E5** Dömötör Orsolya (SzTE): **Ruténium(II)-polipiridil komplexek előállítása, oldatkémiai jellemzése és kölcsönhatásuk humán szérum albuminnal és DNS-sel**

16:20-16:40 **E6** Czégéni Csilla Enikő, Udvardy Antal, Horváth Henrietta, Kathó Ágnes, Joó Ferenc, Papp Gábor (DE): **Vízoldható Ru(II)- és Rh(I)-kelát komplexek alkalmazása a homogénkatalitikus hidrogéntárolásban**

16:40-17:00 **E7** Udvardy Antal, Szolnoki Csenge Tamara, Molnár Dávid, Horváth Henrietta, Joó Ferenc, Kathó Ágnes, Papp Gábor (DE): **transz,mer-[RuCl<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)(PTA)<sub>3</sub>] szerepe a vizes közegű hidrogéntárolásban**

17:00-17:20 **E8** Orosz Krisztina, Joó Ferenc, Udvardy Antal, Papp Gábor, Horváth Henrietta (DE): **Ir(I)-NHC és Ir(I)-NHC-foszfin komplexek aktivitása hidrogénezési – dehidrogénezési reakciókban**

18:00- *Vacsora*

05.25. szerda

05.25. szerda

05.25. szerda

05.25. szerda

05.25. szerda

05.25. szerda

05.25. szerda

Elnök: May Nóra Veronika (ELKH)

05.26. csütörtök  
9.30-9.50 **E9** Garda Zoltán, Szilágyi Zsolt, Kovács Attila, János Alexandra, Váradi Balázs, Molnár Enikő, Nagy Tibor, Szeremeta Frédéric, Jakab Tóth Éva, Tircsó Gyula (DE): **Fluortartalmú ligandumok és Mn(II)-, valamint Fe(III)-ionnal alkotott komplexeinek fizikokémiai vizsgálata**

05.26. csütörtök  
9.50-10.10 **E10** Váradi Balázs, Lihi Norbert, Bunda Szilvia, Nagy Antónia, Simon Gréta, Kéri Mónika, Papp Gábor, Tircsó Gyula, David Esteban-Gómez, Carlos Platas-Iglesias, Kálmán Ferenc Krisztián (DE): **Egy fenantrolin alapú, potenciális MRI kontrasztanyag jelölt koordinációs kémiai vizsgálata**

05.26. csütörtök  
10.10-10.30 **E11** Herman Petra, Lihi Norbert, Fábrián István, Almásy László, Kalmár József (DE): **Szelektív szorbensek Hg(II), Pd(II) és Ag(I) megkötésére vizes oldatból**

05.26. csütörtök  
10.30-10.50 **E12** Czuna Alexandra, Molnár Dávid, Kathó Ágnes, Joó Ferenc, Horváth Henrietta, Purgel Mihály, Papp Gábor (DE): **A halogenid-ionok és a pH hatása a *cisz,mer*-[IrH<sub>2</sub>Cl(mtpms)<sub>3</sub>] komplex által katalizált reakciókban**

10.50-11.20 *Szünet*

Elnök: Kalmár József (DE)

05.26. csütörtök  
11.20-11.40 **E13** Silyéné Madarasi Enikő, Axia Marlin, Véronique Patinec, Raphaël Tripier, Carlos Platas-Iglesias, Kálmán Ferenc Krisztián, Tircsó Gyula (DE): **Triazaciklonononán származékok Mg(II), Ca(II), Mn(II), Cu(II), ill. Zn(II)-komplexei: egyensúly, kinetika és relaxometria**

05.26. csütörtök  
11.40-12.00 **E14** Váradi Balázs, Nagy András, Gwladys Nizou, Molnár Enikő, Madarasi Enikő, Garda Zoltán, Kálmán Ferenc Krisztián, Maryline Beyler, Raphaël Tripier, Carlos Platas Iglesias, Tircsó Gyula (DE): **Egyszeresen helyettesített piklén pikolinátok előállítása és Mn(II) komplexeinek az összehasonlító koordinációs kémiai jellemzése**

05.26. csütörtök  
12.00-12.20 **E15** Azza A. Hassoon, Szóricsik Attila, Fülöp Livia, May Nóra, Gajda Tamás (SzTE): **A lítikus poliszaharid-monooxigenázok két peptid-alapú kémiai modellje**

12.30-14:00 *Ebéd*

## Koordinációs Kémiai Munkabizottság ülése:

### RADIOKÉMIA ÉS KOORDINÁCIÓS KÉMIA: SZINERGIÁK

**Elnök: Enyedy Éva Anna** (SzTE)

14.00 – 14.10 Megnyitó: Enyedy Éva Anna (SzTE, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság elnöke) és M. Nagy Noémi (DE, az MTA Radiokémiai Tudományos Bizottsága elnöke)

14.10 – 14.30 **E16** Szücs Zoltán (ATOMKI): **A nukleáris medicina számára fontos izotópok előállítása az Atomkiban**

14.30 – 14.50 **E17** M. Nagy Noémi, Kónya József (DE): **Uránkomplexek oldatban és oxidfelületeken**

14.50 – 15.10 **E18** Szücs Dániel, Szabó Judit, Arató Viktória Zsófia, Gyuricza Barbara, Szikra Dezső, Trencsényi György, Tóth Imre, Fekete Anikó (DE): **Albuminkötő egység beépítésének a hatása <sup>68</sup>Ga és <sup>205/206</sup>Bi jelzett NAPamid alapú radiofarmakonok farmakokinetikai tulajdonságaira**

15.10 – 15.30 **E19** Béres Kende Attila, Homonnay Zoltán, Kótai László (ELTE): **Különbféle ligandumokat és oxidálóanionokat tartalmazó vas(III)-komplex sók szintézise, szerkezete és tulajdonságai**

15.30 – 15.50 **E20** Kálmán-Szabó Ibolya, Bunda Szilvia, Szaniszló Zsófia, Lihi Norbert, P. Szabó Judit, Szikra Dezső, Trencsényi György, Kálmán Ferenc Krisztián (DE): **Új típusú Cu(II)-komplexek radioteranosztikai alkalmazásokhoz II.**

15.50-16.20 *Szünet*

16.20-16.40 **E21** Németh Zoltán, Bajnóczi Éva G., Bazsó Gábor, Bogdán Csilla, Keszthelyi Tamás, Papp Mariann, Pápai Mátyás, Rozgonyi Tamás, Sárosiné Szemes Dorottya, Vancza Andor, Vankó György (WIGNER): **Újratervezett funkcionális molekulák: ultragyors dinamika kísérleti és elméleti szemmel**

16.40-17.00 **E22** Varga Flóra, Farkasinszky Gergely, Ésik Zsuzsanna, Dénes Noémi, Kertész István, Miklovicz Tünde, Németh Enikő, Rubleczky Béla, Pótári Norbert, Trencsényi György, Forgács Viktória, Jószai István (DE): **A [<sup>68</sup>Ga]Ga-PSMA-11 tartalmú radiogyógyszer klinikai vizsgálati engedélyeztetése**

05.26. csütörtök

05.26. csütörtök

05.26. csütörtök

05.26. csütörtök

05.26. csütörtök

05.26. csütörtök

05.26. csütörtök

05.26. csütörtök

17.00-17.20 **E23** Gyuricza Barbara, Szűcs Ágnes, P. Szabó Judit, Arató Viktória, Szűcs Dániel, Szikra Dezső, Trencsényi György, Fekete Anikó (DE): **Galektin-3 receptor detektálása melanoma sejtekben <sup>68</sup>Ga-jelzett (2-naftil)metilezett laktóz-amin alapú radioligandokkal**

05.26. csütörtök

17.20-17.40 **E24** Kutus Bence, Böszörményi Éva, Peintler Gábor, Sipos Pál (SzTE): **Komplexbépződés neodímium-, kalcium- és glükonátionokat tartalmazó vizes oldatokban, pH = 2 és 14 között**

05.26. csütörtök

17.40-18.00 **E25** Lakatos Gergő, Csupász Tibor, Tircsó Gyula (DE): **Egy merevített makrociklusos pikolinátszármazék ritkaföldfém(III)-komplexei: előállítás és koordinációs kémiai jellemzés**

05.26. csütörtök

18.00-18.10 Elnöki zárszó

05.26. csütörtök

18:30- *Vacsora*

05.26. csütörtök



## MÁJUS 27. (PÉNTEK)

Elnök: Buglyó Péter (DE)

9.30-9.50 **E26** Balogh Bettina, Várnagy Katalin (DE): **A tau fehérje két kötőhelye (His32 és His329-330) fémionkötő képességének összehasonlítása**

9.50-10.10 **E27** Hajdu Bálint, Nafae H. Zeyad, Hunyadi-Gulyás Éva, Gyurcsik Béla (SzTE): **Fémkötő helyek fehérjékben**

10.10-10.30 **E28** Pósa Vivien, Tusa László Gy., Spengler Gabriella, May Nóra Veronika, Christian R. Kowol, Enyedy Éva Anna (SzTE): **A rákellenes VLX600 vaskelátor endogén fémionokkal való kölcsönhatásának oldatkémiai vizsgálata**

10.30-10.50 **E29** Mészáros János Péter, Spengler Gabriella, Alexander Prado-Roller, Wolfgang Kandioller, Bernhard K. Keppler, Enyedy Éva Anna (SzTE): **Sav-aktiválta rákellenes félszendvics komplexek előállítása és oldatkémiai vizsgálata**

10.50-11.20 *Szünet*

Elnök: Horváth Henrietta (DE)

11.20-11.40 **E30** Kapus István, Csupász Tibor, Váradi Balázs, Tircsó Gyula (DE): **8-Oxikinolinátcsoportot tartalmazó makrociklusos ligandumok előállítása és koordinációs kémiai jellemzése**

11.40-12.00 **E31** Csupász Tibor, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **Angiográfiás vizsgálatokhoz tervezett makrociklusos Mn(II)-komplex előállítása és jellemzése**

12.00-12.20 **E32** Székely Enikő, Várnagy Katalin (DE): **Az oldalláncok szerepe a SOD enzimet modellező peptidek komplexképző sajátságaira**

12.30-14.00 *Ebéd*

05.27. péntek

05.27. péntek

05.27. péntek

05.27. péntek

05.27. péntek

05.27. péntek

05.27. péntek



# **Előadás-összefoglalók**



## A CueR fémszabályzó fehérje C-terminális CCHHRAG fragmensének szerepe a fémionkötőhely stabilizálásában

*Balogh Ria<sup>a</sup>, Gyurcsik Béla<sup>a</sup>, Mikael Jensen<sup>b</sup>, Peter W. Thulstrup<sup>c</sup>, Ulli Köster<sup>d</sup>, Niels J. Christensen<sup>c</sup>, Marianne L. Jensen<sup>e</sup>, Hunyadi-Gulyás Évd<sup>f</sup>, Lars Hemmingsen<sup>c</sup>, Jancsó Attila<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Hevesy Laboratory, Center for Nuclear Technologies, Technical University of Denmark

<sup>c</sup> Department of Chemistry, University of Copenhagen

<sup>d</sup> Institut Laue-Langevin, Grenoble

<sup>e</sup> Niels Bohr Institute, University of Copenhagen

<sup>f</sup> Proteomika Laboratórium, Szegedi Biológiai Kutatóközpont, ELKH

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

A bakteriális réz-efflux szabályzó CueR fehérje szelektív transzkripciós választ ad  $\text{Cu}^{\text{I}}$ ,  $\text{Ag}^{\text{I}}$  vagy  $\text{Au}^{\text{I}}$  ionok sejten belüli szintjének megnövekedésére. Ebben döntő szerepe van a fémionok lineáris koordinációs módú koordinációjának a fehérje C-terminusa közelében elhelyezkedő fémkötő hurok két cisztein oldalláncához.[1] Az *E. coli* CueR fehérje C-terminális, CCHHRAG szekvenciájú fragmensében további, potenciális fémionkötő ligandumok találhatóak. Ezek közül egy cisztein aminosav, a fémkötő hurok két ciszteinje mellett, részt vehet a  $\text{Hg}^{\text{II}}$  ionok trigonális koordinációs környezetben való kötésében, így módon a fémkötő hurok szerkezetének átrendeződését,[2] és ezzel valószínűsíthetően a fehérje funkció gátlását eredményezve.

Előadásunkban a CCHHRAG szakasznak a CueR egyértékű  $d^{10}$  fémionok megkötődésében játszott szerepét tárgyaljuk úgy, hogy összevetjük a vad típusú *E. coli* CueR (WT-CueR) és a C-terminális szakaszt nem tartalmazó variáns ( $\Delta\text{C7}$ -CueR) kölcsönhatását  $\text{Ag}^{\text{I}}$  ionokkal. Ugyan eredményeink nem utalnak a CCHHRAG közvetlen részvételére az  $\text{Ag}^{\text{I}}$  megkötésében, CD- és ESI-MS adataink az  $\Delta\text{C7}$ -CueR jelentősen kisebb  $\text{Ag}^{\text{I}}$ -affinitását mutatják a vad típusú fehérjével összehasonlítva.  $^{111}\text{Ag}$  PAC spektroszkópiai eredményeink is azt tükrözik, hogy a WT-CueR  $\text{Ag}^{\text{I}}$  komplexére jellemző lineáris  $\text{AgS}_2$  szerkezet az  $\text{Ag}^{\text{I}}$  -  $\Delta\text{C7}$ -CueR rendszerben kevésbé domináns. Azaz, bár a CCHHRAG fragmens viszonylag távol található a fémkötőhelytől, intramolekuláris kölcsönhatások révén mégis részt vesz annak stabilizálásában.

[1] A. Changela et al., *Science* **2003**, *301*, 1383-1387.

[2] R. K. Balogh et al. *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 15030-15035.

**Az As(III) és Hg(II) kölcsönhatása az AfArsR fémszabályzó fehérje  
félfémkötő szakaszát modellező oligopeptiddel**

*Tóth Annamária<sup>a</sup>, Sajdik Kadosa<sup>a</sup>, Gyurcsik Béla<sup>a</sup>, Kele Zoltán<sup>b</sup>, Wéber Edit<sup>b</sup>, Szekeres  
Levente István<sup>a</sup>, Peter W. Thulstrup<sup>c</sup>, Lars Hemmingsen<sup>c</sup>, Juliana Schell<sup>d</sup>, Jancsó Attila<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytan Intézet

<sup>c</sup> University of Copenhagen, Department of Chemistry

<sup>d</sup> European Organization for Nuclear Research (CERN) 1211 Geneva, Switzerland

e-mail: toth.annamaria@chem.u-szeged.hu

A számos baktériumban megtalálható ars operon a sejtek arzén (III/V) és antimon (III/V) elleni védekezéséért felel. Ezen operon transzkripció szabályzását végző ArsR fehérjék a félfémeket három ciszteinjük tiol-oldalláncaival kötik meg, ami iniciálja a szabályzott gén transzkripcióját.[1] Habár a félfémregulátor ArsR fehérjék szelektivitása közvetlenül még nem bizonyított, néhány bioszenzorral foglalkozó tanulmányban található erre vonatkozó adat.[3]

A félfém felismerés, illetve az ArsR szelektív működésének molekuláris háttere még nincs teljesen feltérképezve. Jelen kutatásunkban ezekre a kérdésekre egy olyan modellpeptid (L) vizsgálatával keresünk válaszokat, melynek Ac-NCCHGTRDCA-NH<sub>2</sub> szekvenciája az *Acidithiobacillus ferrooxidans* baktériumból származó ArsR fehérje (AfArsR) C-terminális As(III)/Sb(III) -kötő szakaszának ( $\alpha 5$ ) aminosav-szekvenciájával egyezik meg. Kísérleteink célja a ligandum arzénessavval, illetve a szintén tiofil karakterű Hg(II) ionnal való kölcsönhatásának összehasonlítása volt. A különböző spektroszkópai adatok alapján az As(III) bármely körülmény között kizárólag egyféle, feltételezhetően trigonális piramisos szerkezetű monokomplexet alakít ki a ligandummal. A Hg(II) – peptid rendszerben ugyanakkor eltérő protonáltsági állapotú, és koordinációs szférájú részecskék képződését mutattuk ki. A  $pK_s \sim 6,5$  deprotonálódási állandóval jellemezhető egyensúlyi folyamatban egy közel lineáris geometriájú, {HgS<sub>2</sub>} típusú komplex három tiolát által koordinált, erősen torzult síkháromszöges geometriájú {HgS<sub>3</sub>} részecskévé alakul át. A megfigyelt szerkezetbeli eltéréseknek szerepe lehet a félfémszabályzó fehérjék fémion-szelektív működésében is.

[1] C. Prabakaran et al. *Journal of Structural Biology*, **2019**, 207, 209-217.

[2] Z. Ma et al. *Chemical Reviews*, **2009**, 109, 4644-4681.

[3] V.H-C. Liao et al. *Environmental Toxicology and Chemistry*, **2005**, 24, 1624-1631.

## Terner kalcium – neodímium – glükonát rendszert leíró kémiai modell meghatározása

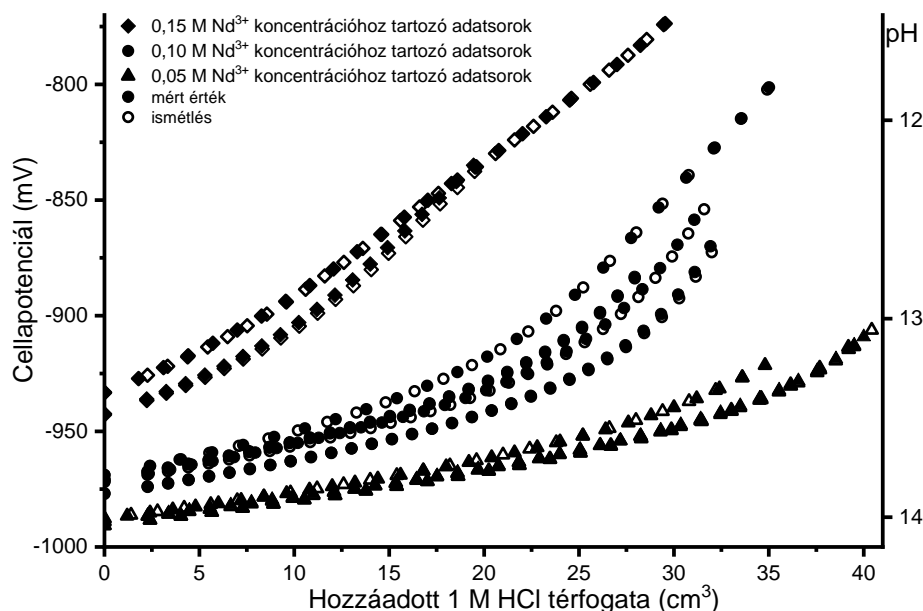
*Böszörményi Éva<sup>a</sup>, Kutus Bence<sup>a</sup>, Dömötör Orsolya<sup>a</sup>, Peintler Gábor<sup>b</sup>, Sipos Pál<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szeretlen és Analitikai kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Fizikai kémiai Tanszék

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

A radioaktív hulladéktárolókban nagy mennyiségben jelenlévő aktinoidák oldhatóságát jelentősen befolyásolja a tárolóban jelenlévő szerves ligandumokkal kialakuló biner [1], valamint magas kalciumtartalmú rendszerek esetében képződő terner komplexek stabilitása [2]. Az +3-as oxidációs állapotú aktinoida fémionok komplexképző folyamatainak megismeréséhez leggyakrabban alkalmazott modell a  $\text{Nd}^{3+}$ , míg a szerves molekulák egyik modellvegyülete a nátrium-D-glükonát. Kutatásunk célja a kalcium-, neodímium- és glükonátionokat tartalmazó, tömény lúgos oldatok egyensúlyait leíró kémiai modell felállítása, amelyet potenciometriás és spektrofotometriás adatok együttes illesztésével végeztünk.



**1. ábra:** Kalcium-, neodímium- és glükonáttartalmú oldatok potenciometriás titrálási görbéi

[1] J. Tits, E. Wieland, M.H. Bradbury, *Applied Geochemistry*, **2005**, *20*, 2082–2096.

[2] H. Rojo, X. Gaona, Th. Rabung, R. Polly, M. García-Gutiérrez, T. Missana, M. Altmaier, *Applied Geochemistry*, **2021**, *126*, 104864.

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

## **A trikálcium-aluminát előállítása ipari körülmények között és semlegesítési folyamatainak feltérképezése**

*Kása Eszter<sup>a</sup>, Szabó Yvette<sup>a</sup>, Szabados Márton<sup>a</sup>, Kutus Bence<sup>b</sup>, Bellahsen Naoufal<sup>a</sup>, Sipos Pál<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék, Szeged, Dóm tér 8.

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged, Dóm tér 7.

e-mail: eszterorban94@chem.u-szeged.hu

A trikálcium-aluminát (TCA,  $\text{Ca}_3[\text{Al}(\text{OH})_6]_2$ ) a vörösiszap egyik fő komponense, mely nagy mennyiségben halmozódhat fel a tárolókban. Szuszpenziója erősen lúgos közeget eredményez ( $\text{pH} \approx 12$ ), ezáltal nagymértékben hozzájárul a vörösiszap magas lúgtartalmához [1]. Utóbbi semlegesítése, illetve újrahasznosítása környezetvédelmi szempontból kiemelt fontosságú [1,2], ehhez azonban elengedhetetlen a különböző szennyezők, így a TCA semlegesítési reakcióinak jellemzése.

Munkánk során az alumíniumiparban is használt körülmények között, magas hőmérsékleten és tömény aluminátoldat felhasználásával állítottunk elő trikálcium-aluminátot. Az így kapott szilárd anyagot jellemeztük kristályosság, morfológia és elemi összetétel szempontjából, ami alapján megállapítottuk, hogy sikerült fázisztiszta ( $> 98\%$  tisztaságú), kristályos TCA-t készíteni. Ezt követően a TCA vizes közegű oldódási és semlegesítési folyamatait vizsgáltuk potenciometriás titrálás alkalmazásával, sósavat használva titrálószerként. Ezenkívül röntgendiffraktometria segítségével tanulmányoztuk a szilárd fázisban esetlegesen bekövetkező változásokat a reakció során. Eredményeink az eddig feltételezett mechanizmus (miszerint először a  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , majd az  $\text{Al}(\text{OH})_3$  semlegesítése játszódik le) helyett egy másik reakcióutat valószínűsítünk: a TCA semlegesítése során először hidrokalumit,  $[\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6]\text{Cl}$  képződik, mint köztitermék, ami további sav hozzáadására alakul át jól oldódó kalciumsóvá és amorf alumínium-hidroxiddá.

Összességében tehát nem csak egy új előállítási módszert dolgoztunk ki a TCA laboratóriumi előállítására, de a szilárd anyag szuszpenziójának a semlegesítési mechanizmusára is javaslatot tettünk.

[1] P. Kannan, F. Banat, S.W. Hasan, M.A. Haija, *Hydrometallurgy*, **2021**, 206, 105758-105771.

[2] K. Evans, *Journal of Sustainable Metallurgy*, **2016**, 2, 316-331.

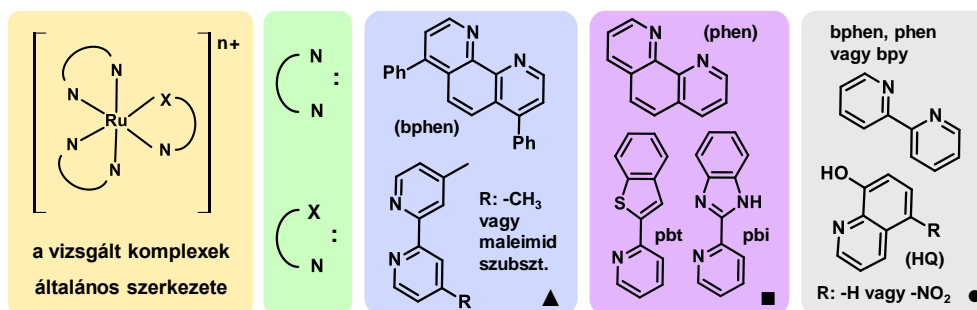


## Ruténium(II)-polipiridil komplexek előállítás, oldatkémiai jellemzése és kölcsönhatásuk humán szérum albuminnal és DNS-sel

*Dömötör Orsolya*

MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Interdiszciplináris Kiválósági Központ, Szegedi Tudományegyetem  
e-mail: domotor.o@chem.u-szeged.hu

A Ru(II)-polipiridil komplexek koordinációs szférája telített, ligandumcsere szempontjából inerte. Rákellenes aktivitásuk így alapvetően függ a koordinálódó ligandumok szerkezetétől. A *tris*-polipiridil komplexek többek között fotodinámias terápiában (PDT) nyerhetnek alkalmazást (pl. TLD-1433, jelenleg klinikai kipróbálás alatt) [1,2], míg más komplexek a kiterjedt aromás ligandumaik révén a DNS láncba interkalálódva gátolják a sejtosztódást [1]. Az is előfordul, hogy a harmadik pozíciót más típusú ligandum foglalja el [3].



Az előadásban bemutatott komplexek két egymással megegyező polipiridil ligandumot tartalmaznak és a harmadik ligandum alapján csoportosíthatók (ld. ábra): PDT-ra kifejlesztett *tris*-polipiridil komplexek (kék mező, ▲), ill. pbi és pbt ligandumokat (lila, ■), valamint HQ ligandumot (szürke, ●) tartalmazó komplexek. Vizsgáltuk ezen fémkomplexek *in vitro* rákellenes aktivitását, vizes oldatbeli stabilitását, lipofilitását, fotolumineszcens tulajdonságait és a humán szérum albuminnal ill. DNS-sel való kölcsönhatásukat. Meghatároztuk a komplexek *n*-oktanol/víz megoszlási hányadosát és membrán permeabilitását, továbbá UV-látható spektrofotometriát, spektrofluorimetriát és ultraszűrést alkalmaztunk az oldatbeli kölcsönhatások feltárására.

[1] M. Mital et al., *Coord Chem Rev.* 2018, 375, 434-58.

[2] <https://clinicaltrials.gov/ct2/show/NCT03945162?term=tld1433&draw=2&rank=2>

[3] D. Havrylyuk et al., *Eur. J. Med. Chem.* 2018, 156, 790-99.

**Köszönetnyilvánítás:** Magyar-Portugál Kétoldalú Tudományos és Technológiai Együttműködés TÉT-PT-2018-00002, TKP-2021-EGA-32, OTKA PD131472; Bolyai János Kutatási Ösztöndíj.

## Vízoldható Ru(II)- és Rh(I)-kelát komplexek alkalmazása a homogénkatalitikus hidrogéntárolásban

*Czégéni Csilla Enikő<sup>a</sup>, Udvardy Antal<sup>b</sup>, Horváth Henrietta<sup>a</sup>, Kathó Ágnes<sup>b</sup>, Joó Ferenc<sup>a,b</sup>,  
Papp Gábor<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék,

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

Az egyre fokozódó energiaszükséglet arra ösztönzi a kutatókat, hogy olyan folyamatokat, technikákat fejlesszenek ki, amelyekhez nincs szükség fosszilis tüzelőanyagokra, alternatív energiahordozókat, megújuló energiaforrásokat helyezzenek előtérbe. Ez fontos szempont, mind környezeti, mind gazdasági megfontolásból. Egy ígéretes megoldás lehet a hidrogén, mint energiavektor, azonban nyilvánvaló előnyei ellenére a hidrogén ilyen célú alkalmazása számos kihívással jár. Széleskörű alkalmazásának legfőbb akadálya, hogy a hatékony tárolása és kezelése nehézkes és balesetveszélyes. Ezért széleskörű kutatások folynak a hidrogéngáz tárolására és felszabadítására szolgáló biztonságos megoldás megtalálására. A hangyasav/formiát rendszer egyike lehet a hidrogéntárolásban alkalmazható anyagoknak, mivel megfelelő katalizátorok alkalmazásával a hangyasavból szelektíven H<sub>2</sub> és CO<sub>2</sub>, míg formiát oldatokból tisztán H<sub>2</sub> gáz állítható elő. Kutatócsoportunkban számos új, vízoldható foszfin, N-heterociklusos karbén, illetve NHC-foszfin komplexet tanulmányoztunk már vizes közegű hidrogéntárolásban, mind a H<sub>2</sub>-fejlesztési mind pedig a hidrogénezési reakciókban egyaránt [1,2,3].

A hangyasav/formiát rendszer dehidrogénezését atmoszférikus gázbürettában, míg a NaHCO<sub>3</sub> hidrogénezését nyomásálló üvegreaktorban végeztük. Megállapítottuk, hogy az alkalmazott *in situ* előállított új típusú vízoldható Ru(II)-és Rh(I)-PNP komplex katalizátorokkal (PNP = lutidin vázú három fogú kelát típusú ligandumok) is megvalósítható egy hidrogéntároló ciklus, igazoltuk aktivitásukat a ciklus mindkét reakciójában.

[1] G. Papp, J. Csorba, G. Laurenczy, F. Joó *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 10433-10435

[2] H. Horváth, G. Papp, R. Szabolcsi, Á. Kathó, F. Joó *ChemSusChem* **2015**, *8*, 3036-3038

[3] G. Papp, G. Ölveti, H. Horváth, Á. Kathó, F. Joó *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 14516-14519

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alapnak (NKFI-FK128333). A tanulmány alapjául szolgáló kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium által meghirdetett Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-04) támogatta.

***transz,mer*-[RuCl<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)(PTA)<sub>3</sub>] szerepe a vizes közegű hidrogéntárolásban**

*Udvardy Antal<sup>a</sup>, Szolnoki Csenge Tamara<sup>a,b</sup>, Molnár Dávid<sup>a</sup>, Horváth Henrietta<sup>c</sup>,*

*Joó Ferenc<sup>a,c</sup>, Kathó Ágnes<sup>a</sup>, Papp Gábor<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>b</sup> Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

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

A XX. század második felétől Földünk energiaigénye folyamatosan növekszik, melyet a fosszilis energiahordozók elégetése fedez. Ezek kiváltására több megújuló energiaforrást használhatunk, azonban ezek ingadozó-jellege miatt a megtermelt energiát tárolni kell. Egyre népszerűbb a hidrogénben történő energiátárolás, de a gáz halmazállapotú hidrogén szállítása és tárolása nehézkes és balesetveszélyes. Ennek egyik megoldása lehet az úgynevezett kémiai „hidrogéntárolók” alkalmazása. Ilyen lehetséges vegyületek a hangyasav (hidrogénsűrűség 4,4 tömeg%) és annak sói, a formiátok is.

A HCOOH megfelelő katalizátor jelenlétében szelektíven CO<sub>2</sub>-ra és H<sub>2</sub>-re bomlik, azonban vizes formiát-oldatokból csak H<sub>2</sub> fejlődik, és hidrogénkarbonát-ion marad vissza[1].

A Debreceni Egyetemen működő Homogén Katalízis Kutatócsoportban kifejlesztettek reverzibilisen működő „H<sub>2</sub>-akkumulátort”, melyben a [ $\{\text{RuCl}_2(\text{mtpms-Na})_2\}_2$ ] (mtpms-Na = meta helyzetben szulfonált trifenilfoszfin-nátriumsója) dehidrogénezi a vizes HCOONa-ot, és ugyanez a katalizátor formiáttá hidrogénezi a HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>-ot ugyanebben az oldatban[2].

A Kutatócsoportunkban egyre nagyobb figyelmet fordítunk a vízoldható 1,3,5-triaza-7-foszfadantán (PTA) ligandum alkalmazására is. A PTA nagy előnye a szulfonált foszfinokkal szemben, hogy még lúgos oldatban sem oxigénérzékeny[3].

Kutatásunk középpontjában a [RuCl<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)(PTA)<sub>3</sub>] áll, melynek vizes oldata készségesen dehidrogénezi a HCOOH-t és a HCOONa-t 80 °C-on, valamint vizsgálataink rávilágítottak arra is, hogy alkalmas a HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> hidrogénezésére. Ezzel újabb katalizátorról igazoltuk, hogy alkalmazható a vizes közegű, reverzibilis hidrogéntárolásban.

[1] D. Wei, R. Sang, A. Moazezbarabadi, H. Junge, M. Beller, *JACS Au*, DOI: 10.1021/jacsau.1c00489

[2] G. Papp, J. Csorba, G. Laurenczy F. Joó, *Angew. Chem. Int. Edit.* **2011**, *50*, 10433

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

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönöm a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak (NKFI-FK128333). A tanulmány alapjául szolgáló kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium által meghirdetett Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-04) támogatta.

## Ir(I)-NHC és Ir(I)-NHC-foszfín komplexek aktivitása hidrogénezési – dehidrogénezési reakciókban

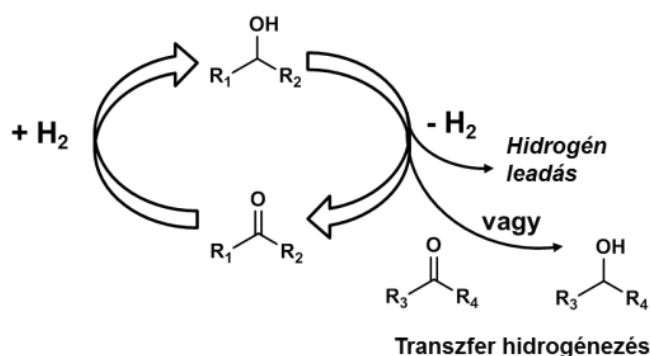
*Orosz Krisztina<sup>a,b</sup>, Joó Ferenc<sup>a,c</sup>, Udvardy Antal<sup>a</sup>, Papp Gábor<sup>a</sup>, Horváth Henrietta<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>b</sup> Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>c</sup> MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen  
e-mail: orosz.krisztina@science.unideb.hu

Számos új, részben már ismert *N*-heterociklusos karbén (NHC) ligandumokat (mmim = 1,3-dimetilimidazólium klorid, emim = 1-etil-3-metilimidazólium klorid, hexmim = 1-hexil-3-metilimidazólium klorid, Bnmim = 1-benzil-3-metilimidazólium klorid) részben újonnan szintetizált, kétfogú NHC ligandumokat, esetenként foszfint tartalmazó irídium komplexet szintetizáltunk [1-2]. Az előállított komplexek aktív katalizátorai ketonok hidrogénezési, transzfer hidrogénezési reakciójának [3], valamint a ketonok hidrogénezésével képződő alkoholok dehidrogénezési reakcióját is kitűnően katalizálják, ezáltal lehetővé téve a keton/szekunder alkohol alapú hidrogéntároló/fejlesztő katalitikus ciklus megvalósítását.



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

[2] K. Orosz, Cs. E. Czégéni, A. Udvardy, G. Papp, N. Marozsán, Á. Kathó, F. Joó, H. Horváth: *Phosphorus Sulfur Silicon Relat. Elem.*, **2022**, 4, 1-4.

[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.

## Fluortartalmú ligandumok és Mn(II)-, valamint Fe(III)-ionnal alkotott komplexeinek fizikokémiai vizsgálata

*Garda Zoltán<sup>a</sup>, Szilágyi Zsolt<sup>a</sup>, Kovács Attila<sup>a</sup>, Jármos Alexandra<sup>a</sup>, Váradi Balázs<sup>a</sup>, Molnár Enikő<sup>a</sup>, Nagy Tibor<sup>b</sup>, Szeremeta Frédéric<sup>b</sup>, Jakab Tóth Éva<sup>b</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék 4032, Debrecen, Magyarország

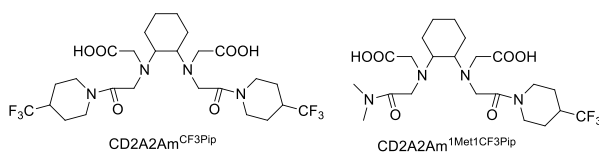
<sup>c</sup> Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS UPR 4301, Sadron, 45071 Orléans, France

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

A Gd(III)-iont tartalmazó MRI kontrasztanyagokkal kapcsolatban felmerült problémák [1-3] új kutatásokat eredményeztek, amelyek célja az emberi szervezet számára kezelhetőbb fémionokra alapozó kontrasztanyag-jelöltek kifejlesztése. Ezen fémionok között központi szerep jut a Mn(II)- és Fe(III)-tartalmú vegyületeknek. Nagy mennyiségben (ami indokolt egy kontrasztanyag jelenlétében elvégzett MRI vizsgálat során) ezek a fémionok szintén toxikusak lehetnek az emberi szervezet számára így a Gd(III)-ionhoz hasonlóan valamilyen komplexképzőbe való „csomagolásukat” követően merülhet fel az alkalmazásuk. Ezért a Gd(III)-komplexek esetén vizsgált paramétereket, úgy mint a termodinamikai stabilitásukat, kinetikai inertségüket és a kontrasztnövelő hatásukat azaz relaxivitásukat, ezekben az esetekben is fel kell térképezni. Azonban Mn(II)- és Fe(III)-komplexek vizsgálatánál a redoxistabilitást is figyelembe kell venni a megfelelő érzékenység megtartásához és a biztonságos alkalmazáshoz.

Habár több elméleti lehetőség is kínálkozik a kontrasztanyagok szerkezeten belüli helyi koncentrációjának mérésére (PET-MRI vagy <sup>1</sup>H-<sup>19</sup>F MRI) ezen „csatolt” technikák alkalmazása és elérhetősége egyelőre limitált. Az egyik ilyen lehetőség a fluortartalmú molekuláris ligandum szerkezetébe való beépítése lehet, amely esetben <sup>19</sup>F MRI képalkotás segítségével megállapítható a kontrasztanyag valós idejű eloszlása a szervben/szerkezeten belül.

Ezen kihívásokra válaszolva (Gd(III)-ion cseréje Mn(II)- vagy Fe(III)-ionra; fluor beépítése stb.) a kutatásunk során olyan *transz*-CDTA származékokat állítottunk elő (CD2A2Am<sup>CF3Pip</sup> és CD2A2Am<sup>1Me1CF3Pip</sup>), amelyek tartalmaznak fluoratomokat is és vizsgáltuk ezen kelátorok Mn(II)-, ill. Fe(III)-ionokkal képzett komplexeit. Ezen vizsgálatok eredményeit fogja bemutatni a tervezett előadás.



**1. ábra:** A vizsgált fluortartalmú ligandumok szerkezeti képletei

[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) PD-138064 és K-134694 sz. pályázatai támogatták.

**Egy fenantrolin alapú, potenciális MRI kontrasztanyag jelölt  
koordinációs kémiai vizsgálata**

Váradi Balázs<sup>a</sup>, Lihi Norbert<sup>b</sup>, Bunda Szilvia<sup>a</sup>, Nagy Antónia<sup>a</sup>, Simon Gréta<sup>a</sup>, Kéri Mónika<sup>a</sup>,  
Papp Gábor<sup>a</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>, David Esteban-Gómez<sup>c</sup>, Carlos Platas-Iglesias<sup>c</sup>,  
Kálmán Ferenc Krisztián<sup>a</sup>

<sup>a</sup> DE, TTK, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>b</sup> DE, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>c</sup> CICA and Departamento de Química, Univer-sidade da Coruña, 15071 A Coruña, Spain  
e-mail: bunda.szilvia@science.unideb.hu

Az MRI kontrasztanyagokkal (CA) kapcsolatban felmerült aggályok – a kontrasztanyagok *in vivo* disszociációjához köthető új betegség, a Nefrogén Szisztémás Fibrózis (NSF) megjelenése – a CA kutatás fellendülését eredményezte.<sup>1</sup> Az évek során két fő kutatási irány erősödött meg, amelyek közül az egyikben a Gd(III)-tartalmú kontrasztanyagok inertségének növelésére fókuszálnak a kutatók, míg a másokban a CA-ok biokompatibilissá tétele a cél azáltal, hogy szervezetközeli paramágneses átmeneti fémionokkal (Mn(II) vagy Fe(III)) helyettesítik a Gd(III)-iont. A Gd(III)-komplexek inertsége elméletileg növelhető a ligandum szerkezetének merevítésével. Egy kiváló példa erre a Gd(III)-ion CDTA (*transz*-1,2-diaminociklohexán-N,N,N',N'-tetraecetsav) ligandummal alkotott komplexe, amelynek inertsége 60-szor nagyobb az EDTA (etiléndiamin-tetraecetsav) komplexénél, azáltal, hogy az EDTA gerincét ciklohexán gyűrűre cseréljük.<sup>2,3</sup> Az irodalomban számos merev szerkezetű, struktúrájukban aromás rendszert tartalmazó ligandumot találunk a lantanoidák lumineszcens sajátosságainak kiaknázására. Ilyen például a Tb(III) analitikára tervezett FENTA (1,10-fenantrolin-2,9-diil)bisz(methyliminodiacetsav) ligandum is, amely Gd(III)-komplexének tulajdonságait eddig még nem tanulmányozták.<sup>4</sup> A vizsgálatokból kiderült, hogy a [Gd(FENTA)]<sup>-</sup>-komplex mindegyik tulajdonsága legalább olyan jó, vagy jobb mint a klinikai gyakorlatban alkalmazott [Gd(DTPA)]<sup>2-</sup>-komplexé, ami biztató a kontrasztanyag fejlesztés szempontjából.

[1] Grobner, T., *Nephrology Dialysis Transplantation* **2006**, 21 (4), 1104–1108.

[2] Brücher, E.; Szarvas, P., *Inorganica Chimica Acta* **1970**, 4, 632–636.

[3] Nyssen, G. A.; Margerum, D. W., *Inorg. Chem.* **1970**, 9 (8), 1814–1820.

[4] Lin, P.; Zheng, H.; Zhu, Q.-Z.; Xu, J.-G., *Microchimica Acta* **2002**, 140 (1–2), 125–129.

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönetüket fejezik ki az alábbi projektek anyagi támogatásért: NKFIH PD-135169, FK-134551, K-128201, ÚNKP-21-5 (K.F.K.) és ÚNKP-21-4-II (L.N.), Kooperatív Doktori Program Doktori Hallgatói Ösztöndíj (V.B.), Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (K.F.K.).

## Szelektív szorbensek Hg(II), Pd(II) és Ag(I) megkötésére vizes oldatból

*Herman Petra<sup>a</sup>, Lihi Norbert<sup>a</sup>, Fábíán István<sup>a</sup>, Almásy László<sup>b</sup>, Kalmár József<sup>a</sup>*

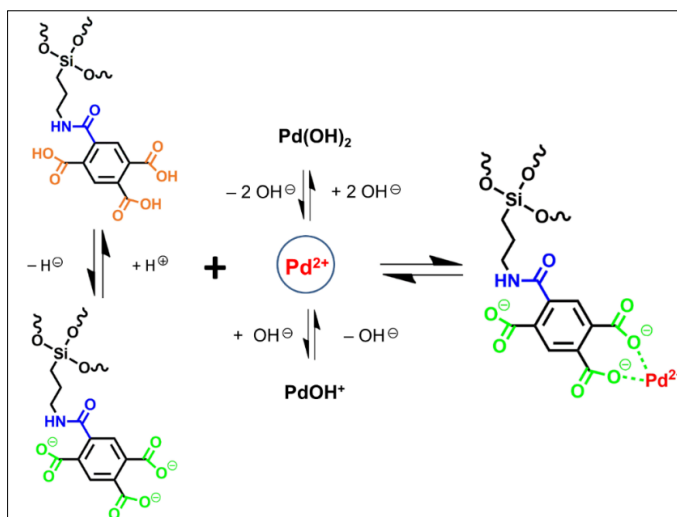
<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> ELKH-Energiatudományi Kutatóközpont, Neutronspektroszkópai Laboratórium

e-mail: herman.petra@science.unideb.hu

Az értékes és esetenként toxikus fémionok vizes közegből történő megkötése és visszanyerése környezetvédelmi és ipari szempontból egyaránt meghatározó jelentőségű. A szelektív szorpciós módszerek kiváló technológiai megoldást jelenthetnek. Munkánk során nagy fajlagos felületű, mezopórusos szorbenseket fejlesztünk, melyeket megfelelő funkcionális csoportok beépítésével teszünk fémion szelektívvé. Az általunk előállított funkcionális aerogélek szelektivitását általában 6-8 különböző oldott fémion együttes jelenlétében teszteljük.

Az előadás során bemutatunk egy 24%-ban zselatint tartalmazó szilika-zselatin aerogélt, mely pH = 6,0-on,  $S = 220$  mg/g-os szorpciós kapacitással, szelektíven köti a Hg(II) iont [1,2]. A szorpciós egyensúly rendkívül gyorsan beáll, és a szorbens hatékonyan regenerálható EDTA-oldat alkalmazásával. Polikarboxilát-funkcionális szilika-zselatin aerogél alkalmazásával a Pd(II) ion szelektív, nagy kapacitású ( $S > 300$  mg/g) szorpcióját valósítottuk meg pH = 2,0-n (1. ábra). A szorpciós egyensúly 2 h alatt beáll, és a kötött Pd(II) visszanyerhető 5 mM metionin oldat alkalmazásával. A merkaptopropil csoportokkal funkcionális, rendezett mikropórusos MCM-41 szilika mikrorészecskék pedig nagy stabilitással és szelektivitással kötik az Ag(I) iont.



1. ábra: A palládiumionok megkötésének feltételezett mechanizmusa polikarboxilát-funkcionális szilika-zselatin aerogélen.

[1] P. Herman, I. Fábíán, J. Kalmár, *ACS Applied Nano Materials*, **2020**, 3, 195.

[2] P. Herman, A. Kiss, I. Fábíán, J. Kalmár, G. Nagy, *Chemosphere*, **2021**, 275, 130019.

**Köszönetnyilvánítás:** NKFIH OTKA FK\_124571 és MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (K.J.)

## A halogenid-ionok és a pH hatása a *cis,mer*-[IrH<sub>2</sub>Cl(*mtp*ppms)<sub>3</sub>] komplex által katalizált reakciókban

Czuna Alexandra<sup>a</sup>, Molnár Dávid<sup>a</sup>, Kathó Ágnes<sup>a</sup>, Joó Ferenc<sup>a,b</sup>, Horváth Henrietta<sup>b</sup>,  
Purgel Mihály<sup>a</sup>, Papp Gábor<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>b</sup> MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen  
e-mail: papp.gabor@science.unideb.hu

A Debreceni Egyetemen működő Homogén Katalízis kutatócsoportban több mint 10 éves múltra tekint vissza a reverzibilis kémiai hidrogéntárolás kutatása vizes közegben (HCOOH/HCOO<sup>-</sup> / CO<sub>2</sub>/HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>). Elsőként írtunk le olyan katalitikus rendszert, amely úgynevezett „H<sub>2</sub>-akkumulátorként” működik zárt rendszerben Ru-szulfonált foszfin komplex alkalmazása mellett.[1] Igazoltuk ugyanebben a rendszerben többféle Ir-NHC-foszfin komplex kiemelkedő aktivitását.[2]

2016-ban közöltük a *cis,mer*-[IrH<sub>2</sub>Cl(*mtp*ppms)<sub>3</sub>]-komplex előállítását, jellemzését és mutattuk be kiemelkedő aktivitását hidrogén fejlesztésben HCOOH-ból vizes közegben.[3] Igazoltuk továbbá aktivitását vizes/szerves kétfázisú hidrogénezésben[4] valamint *para*-hidrogénezésben is.[5] Általánosan elmondható, hogy a katalitikusan aktív részecske szerkezete egy-egy adott reakcióban befolyásolhatja a szelektivitást és több esetben az aktivitást is.[6]

Mindez pedig „szabályozható” akár a halogenid ionok feleslegben történő alkalmazásával – hiszen a különböző Ir-halogenid-foszfin komplexek aktivitása eltérő lehet. Továbbá a vizes közegben végrehajtott hidrogénezésben és dehidrogénezésben kiemelkedő szerepe van a közeg pH-jának. A katalitikusan aktív részecske mellett a szubsztrát molekula is változhat.

[1] G. Papp, J. Csorba, G. Laurenczy F. Joó, *Angew. Chem. Int. Edit.* **2011**, *50*, 10433

[2] H. Horváth, G. Papp, R. Szabolcsi, Á. Kathó, F. Joó, *ChemSusChem* **2015**, *8*, 3036-3038

[3] G. Papp, G. Ölveti, H. Horváth, Á. Kathó, F. Joó, *Dalton Trans.* **2016**, *45*, 14516-14519

[4] Gy. Hankó, R. Márton, A. Udvardy, M. Purgel, Á. Kathó, F. Joó, G. Papp, *Inorg. Chim. Acta* **2021**, *522*, 120359

[5] G. Papp, H. Horváth, F. Joó, *ChemCatChem* **2019**, *11*, 3000-3003

[6] Á. Kathó, H.H. Horváth, G. Papp, F. Joó, *Catalysts* **2022**, *12*, 518.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönöm a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak (NKFI-FK128333). A tanulmány alapjául szolgáló kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium által meghirdetett Tématerületi Kiválósági Program (TKP2020-NKA-04) támogatta.



## Triazaciklonononán származékok Mg(II), Ca(II), Mn(II), Cu(II), ill. Zn(II)-komplexei: egyensúly, kinetika és relaxometria

*Madarasi Enikő<sup>a,b</sup>, Axia Marlin<sup>c</sup>, Véronique Patinec<sup>c</sup>, Raphaël Tripier<sup>c</sup>,*

*Carlos Platas-Iglesias<sup>d</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>a</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémia Tanszék

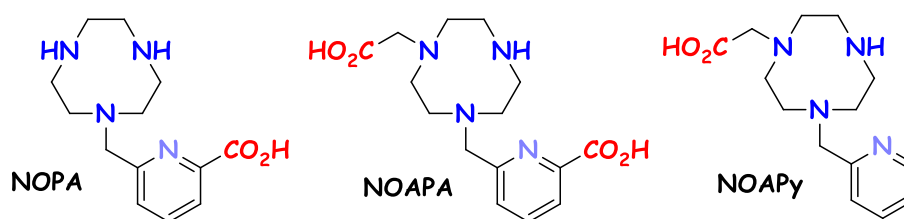
<sup>b</sup> Kémia Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1., Magyarország

<sup>c</sup> Univ. Brest, UMR-CNRS 6521 CEMCA, 6 avenue Victor le Gorgeu, 29238 BREST, France

<sup>d</sup> Universidade da Coruña, Campus da Zapateira-Rúa da Fraga 10, 15008 A Coruña, Spain

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

A Mágneses Rezonanciás Képzőképzés (MRI) korunk egyik legfontosabb orvosdiagnosztikai eszköze. A vizsgálat idejének rövidítése, ill. a kép kontrasztjának növelése érdekében Gd(III)-alapú kontrasztanyagokat alkalmaznak. Használatuk során problémák merültek fel (felhalmozódás a szervezetben, Nefrogén Szisztémás Fibrózis megbetegedések stb.), így a paramágneses esszenciális fémionok (Mn(II), Fe(III) stb.) komplexeinek a vizsgálata jelentősen megélénkült. Számos vizsgálatot folytattak a triazaciklononán származékokkal is. Az egy pikolinátcsoportot tartalmazó ligandum (NOPA) mangán(II)komplexe tartalmaz a fémionhoz koordinálódó vízmolekulát (a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatok alapján),<sup>[1]</sup> azonban a Mn(II)-komplexe nem kellően inert; a paraméter javulását a szerkezet egy acetát oldallánccal való kiegészítésétől vártuk (NOAPA). Arra is kíváncsiak voltunk, hogy hogyan változnak az egyensúlyi, kinetikai, ill. relaxációs paraméterek, ha kétfogú pikolinát oldallanc donoratomjait szétválasztjuk egy-egy külön oldallánccra (NOAPy). Az előadás ezen ligandumok Mg(II)-, Ca(II)-, Mn(II)-, Cu(II)-, ill. Zn(II)-komplexeinek az oldategyensúlyi, valamint a Mn(II)-kelátok kinetikai és relaxációs paramétereinek az összehasonlítását mutatja majd be.



1. ábra: A NOPA, NOAPA, NOAPy kelátorok szerkezete.

[1] E. Molnár, et al. *Inorg. Chem.*, **2014**, *53*(10), 5136-5149.

**Köszönetnyilvánítás:** A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K- 134694, FK-134551 valamint a 2019-2.1.11-TÉT-2019-00084 sz. pályázatai támogatták.

### Egyszeresen helyettesített piklén pikolinátok előállítása és Mn(II)-komplexeinek az összehasonlító koordinációs kémiai jellemzése

*Váradi Balázs<sup>a, b, c</sup>, Nagy András<sup>a</sup>, Gwladys Nizou<sup>d</sup>, Molnár Enikő<sup>a</sup>, Madarasi Enikő<sup>a, b</sup>, Garda Zoltán<sup>a</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>a</sup>, Maryline Beyler<sup>d</sup>, Raphaël Tripier<sup>d</sup>, Carlos Plas-Iglesias<sup>e</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémiai Tanszék,

<sup>b</sup> Kémia Tudományok Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1., Magyarország

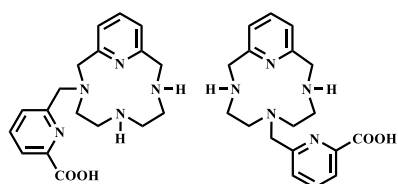
<sup>c</sup> Atommagkutató Intézet, 4026 Debrecen, Bem tér 18/c, Magyarország

<sup>d</sup> University of Brest, UMR-CNRS 6521 CEMCA, 29238 Brest, France

<sup>e</sup> Universidade da Coruña, 15071 Galicia, A Coruña, Spain

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

A központi fémionhoz közvetlenül koordinálódó vízmolekulát tartalmazó Mn<sup>2+</sup>-komplexek az utóbbi időben jelentős figyelmet kaptak, mivel a Gd<sup>3+</sup>-ion alapú mágneses rezonancia képalkotásban (MRI) alkalmazott kontrasztanyagok (KA-k) biztonságosabb alternatíváinak tekintik őket.<sup>[1]</sup> Az elmúlt évtizedben végzett kutatásokra fordított nagy erőfeszítések ellenére csak néhány ligandum jelent elfogadható kompromisszumot a látszólag ellentmondásos követelményeknek, amelyeknek a biztonságos *in vivo* alkalmazásokhoz teljesülniük kell. A Gd<sup>3+</sup>-komplexekhez hasonlóan, a Mn<sup>2+</sup>-komplexek fizikokémiai paraméterei is függenek az azonos oldalláncok alkalmazásakor, azok topológiájától.<sup>[2,3]</sup> A Mn<sup>2+</sup>-komplexek vizsgálatához ezen hatás tanulmányozásához előállítottunk két mono-szubsztituált pikolinát (piridin-2-karbonsav) származékot (3-PCPA és 6-PCPA; *1. ábra*). Jelen előadásban a két ligandum előállításáról, a Mn<sup>2+</sup>-komplexeik koordinációs kémiai jellemzéséről esik majd szó a kelátok egyensúlyi, kinetikai és relaxometriás tulajdonságainak az összehasonlításán keresztül.



**1. ábra:** A 3-PCPA és 6-PCPA ligandumok szerkezete.

[1] Gupta A. és mtsai., *Inorg. Chem.*, **2020**, 59, 10, 6648–6678.

[2] Nizou G. és mtsai., *Inorg. Chem.*, **2021**, 60, 4, 2390–2405.

[3] Garda Z. és mtsai., *Inorg. Chem.*, **2021**, 60, 2, 1133–1148.

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönetet mondanak a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-134694 és 2019-2.1.11-TET-2019-00084 sz. pályázatainak, illetve az Innovációs és Technológia Minisztérium Kooperatív Doktori Program Doktori Hallgatói Ösztöndíj Programjának (KDP-2020). Az ismertetett tudományos eredmények a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Richter Gedeon Talentum Alapítvány támogatásával, „Richter Talentum PhD. ösztöndíj” keretében készültek.

## A lítikus poliszaharid-monooxygenázok két peptid-alapú kémiai modellje

Azza A. Hassoon<sup>a</sup>, Szorcik Attila<sup>a</sup>, Fülöp Livia<sup>b</sup>, May Nóra Veronika<sup>c</sup>, Gajda Tamás<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

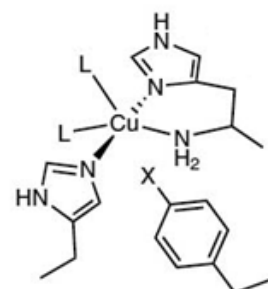
<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytani Intézet

<sup>c</sup> Eötvös Lóránd Kutatási Hálózat, Szerkezetkutató Központ

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

A hidrolízisnek leginkább ellenálló, ugyanakkor a földön legnagyobb mennyiségben megtalálható és étkezési/takarmányozási célra alkalmatlan biopolimerek (lignocellulóz, kitin) hasznos vegyi anyagokká való lebontása korunk egyik legnagyobb biotechnológiai kihívása. Emiatt igen jelentős érdeklődést váltott ki a közelmúltban felfedezett lítikus poliszaharid-monooxygenáz (LPMO) enzimsalád, melyek működésük során oxidatív úton hasítják fenti biopolimerek glikozidos kötéseit, megbontva ezzel azok kvázi-kristályos szerkezetét. Így a poliszaharidok hidrolízisét végző hidrolázok (cellulázok, hemicellulázok) már könnyebben hozzáférhetnek a polimer láncokhoz, teljessé téve azok lebontását.

Ma már jól ismert a réz-tartalmú LPMO-k aktív centrumának szerkezete, azonban számos eltérő hipotézis található az irodalomban az aktív centrum környezetének szerepére, valamint a pontos enzimátikus mechanizmusra vonatkozóan.[1] Ezen kutatásokat segíthetik az egyelőre csekély számú modellvizsgálatok. Ezért jelen munkánk során tanulmányoztuk a HPH és PHPY peptidek réz(II) komplexeit, valamint azok LPMO-utánzó képességét. Eredményeink szerint a



**1. ábra:** Az LPMO-k aktív centrumának sematikus szerkezete (L = H<sub>2</sub>O/OH<sup>-</sup>, X = H vagy OH)

HXH szekvenciájú peptideknél szokásos *mono*- és *bisz*-kompleksek mellett az 1:1 rendszerekben dimerek képződésével is számolni kell pH 6 felett. Ez utóbbiak hidrogénperoxid jelenlétében jelentős hatékonysággal, enzimszerű működés során képesek elősegíteni az LPMO-k modell szubsztrátjának (p-nitrofenil-β-D-glukopiranozid) oxidatív hasítását.

[1] V. V. Vu, S. T. Ngo, *Coord. Chem. Rev.*, **2018**, 368, 134-157.

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönik a GINOP-2.3.2-15-2016-0038 projekt támogatását

## A nukleáris medicina számára fontos izotópok előállítása az Atomkiban

*Szűcs Zoltán*

Atommagkutató Intézet, 4026 Debrecen, Bem tér 18/C

e-mail: zszucs@atomki.hu

Az Atommagkutató Intézet MGC-20 ciklotrona 1985-től, átadása óta egyik fő feladatának tekinti a hazai nukleáris medicina számára történő radioizotóp termelést, új radiógyógyszerek kifejlesztését. A diagnosztikában az olcsó reaktor izotópok mellett a ciklotronon előállítható izotópok közül csupán a PET izotópok maradtak meg: ezek áttekintő bemutatását tartalmazza az előadás. A diagnosztika és terápia igényét is kielégítő úgynevezett teranosztikus izotópok, melyek az Atomki ciklotronán termelhetők, szintén felsorolásra kerülnek. A radionuklidos terápiára alkalmas alfa sugárzó és Auger elektront emittáló izotópok, *in vivo* generátorok, mint a jövő kutatási célpontjai lesznek megemlítve. Az előadás néhány dedikált kérdést is megfogalmaz a komplexkémia kutatói felé, melyek megoldásai nagyban segítenék a radiógyógyszer kutatást.

Izotóp	T <sub>1/2</sub>	Izotóp	T <sub>1/2</sub>	Izotóp	T <sub>1/2</sub>	Izotóp	T <sub>1/2</sub>
11-C	20,4 m	68-Ga	67 m	95-Tc	60 d	148-Eu	55,6 d
13-N	10 m	69-Ge	39 h	99-Rh	16 d	152-Tb	17,5 h
15-O	2 m	71-As	65 h	100-Rh	20,6 h	162-Ho	15 m
18-F	110 m	72-As	26 h	104-Ag	69 m	166-Tm	7,7 h
22-Na	2,6 y	73-Se	40 m	105-Ag	41,3 d	168-Tm	93,1 d
30-P	2,5 m	74-Br	25,4 m	107-Cd	6,5 h	171-Lu	8,22 d
34-Cl	32 m	75-Br	96,7 m	110-In	4,9 h	177-Ta	56,6 h
43-Sc	3,9 h	79-Kr	35 h	117-Sb	2,8 h	180-Re	2,4 m
45-Ti	3 h	81-Rb	30,5 m	124-I	4,2 d	188-Ir	41,5 h
48-V	16 d	87-Y	13,4 h	132-Cs	6,5 d	192-Au	5 h
52-Mn	5,6 d	86-Y	14,7 h	135-La	19,4 h	194-Au	38 h
55-Co	17,3 h	84-Y	39,5 m	140-Pr	3,4m	200-Tl	26,1 h
57-Ni	35,6 h	89-Zr	78,4 h	139-Pr	4,5 h	205-Bi	15,3 d
64-Cu	12,7 h	90-Nb	14,5 h	141-Nd	2,5 h	206-Bi	6,2 d
62-Zn	9,2 h	89-Nb	66 m	141-Pm	20,9 m	207-Bi	31,6 y
65-Zn	243 d	94-Tc	4,9 h	147-Eu	24,6 d	234-Np	4,4 d

Pénz- és időigényes, csak automatizált rendszerben termelhető a rövid felezési idő miatt; Kisebberuházást igényel a termelése; Gond nélkül, azonnal termelhető; A hulladékot hosszabb ideig radioaktív hulladéktárolóban kell őrizni a lebomlásig; Az éves felezési idő miatt nagyon hosszú besugárzási időt igényel, a hulladék kizárólag radioaktív temetőben helyezhető el, ami nagyon költséges.

1. ábra: PET izotópok, amik az ATOMKI debreceni ciklotronján termelhetőek

**Köszönetnyilvánítás:** Ezt az előadást az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapja által finanszírozott TKP2021-NKTA-42 projekt támogatta.

## Uránkomplexek oldatban és oxidfelületeken

*M. Nagy Noémi, Kónya József*

DE Fizikai Kémiai Tanszék, Imre Lajos Izotóplaboratórium

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

Mint az ismeretes, a paksi atomerőműben 2003-ban történt üzemzavar során jelentős mennyiségű urán szennyezte a 2-es reaktorblokk különböző technológiai egységeit. Az ezzel kapcsolatban felmerült analitika és technológiai problémák szükségessé tették, hogy részletesen tanulmányozzuk az uránvegyületek termodinamikailag stabilis kémiai formáit borsavas oldatokban, és megvizsgáljuk annak lehetőségét, hogy az oldatbeli specieszek hogyan kötődnek meg egyes primer körű szerkezeti anyagokon, azaz korrózióálló acél és cirkónium-nióbium felületeken. Ehhez irodalmi tanulmányokat folytattunk, illetve termodinamikai számításokat végeztünk, melyeket további kísérletek tervezésénél használtunk fel.

Ebben az előadásban az irodalmi tanulmányok és termodinamikai megfontolások eredményeit mutatjuk be. Áttekintjük az uránvegyületek termodinamikáját, a vizes oldatokban lehetséges oxidációs állapotokat. Megvizsgáljuk a borsavas oldatokban lejátszódó folyamatokat. Indokoljuk, hogy az oxidatív atmoszférában, vizes oldatban termodinamikailag legstabilabb uranil(VI)-kation miért nem képez komplexet a borsavval. Bemutatjuk a különböző pH-kon képződő hidroxo-, karbonát-, illetve vegyes komplexek kialakulásának termodinamikai paramétereit, a specieszek részarányát a különböző környezeti feltételek mellett.

A szorpciós tulajdonságok becslésénél az oldatban uralkodó kémiai formákból indulunk ki. Figyelembe vesszük a megkötő felületen kialakuló felületi csoportokat. A felületi komplexképződési modell általános elveinek figyelembe vételével megbecsüljük a felületi komplexek, azaz a szorpciós vegyületek kialakulásának esélyeit, ezeket összevetjük az irodalomban fellelhető konkrét kísérleti eredményekkel.

### Albuminkötő egység beépítésének a hatása $^{68}\text{Ga}$ és $^{205/206}\text{Bi}$ jelzett NAPamid alapú radiofarmakonok farmakokinetikai tulajdonságaira

*Szűcs Dániel<sup>a,b,c</sup>, Szabó Judit<sup>a</sup>, Arató Viktória Zsófia<sup>a,d</sup>, Gyuricza Barbara<sup>a,c</sup>, Szikra Dezső<sup>a</sup>, Trencsényi György<sup>a</sup>,  
Tóth Imre<sup>b</sup>, Fekete Anikó<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, ÁOK Orvosi Képző Intézet, Nukleáris Medicina Tanszék, Debrecen

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, TTK Fizikai Kémiai Tanszék, Debrecen

<sup>c</sup> Debreceni Egyetem, Kémiai Tudományok Doktori Iskola, Debrecen

<sup>d</sup> Debreceni Egyetem, Gyógyszerészeti Tudományok Doktori Iskola, Debrecen

e-mail: szucs.daniel@science.unideb.hu

Az alfa melanocita-stimuláló hormon ( $\alpha$ -MSH) fokozza a melamin képződését a melanocortin-1 receptorhoz kötődve. A NAPamid peptid, mint  $\alpha$ -MSH analóg specifikusan kötődik ehhez a receptorhoz, amely jelentős expressziót mutat a melanotikus melanoma sejtekben. A melanoma a hetedik leghalálosabb bőrrák típus. A célzott alfa terápia egyre inkább a tudományos és a klinikai érdeklődés középpontjába kerül, ezért a kutatás célja alfa sugárzó  $^{213}\text{Bi}$  izotóppal jelölt, DOTA-konjugált NAPamid származékok szintézise preklinikai terápiás vizsgálatokhoz. Az ismert radiojelzett NAPamid származékok viszonylag jó tumor felvétellel, ugyanakkor magas vese felvétellel és gyors kiürüléssel jellemezhetőek. A DOTA-NAPamid kémiai felépítését albuminkötő egység, nevezetesen 4-(p-jód-fenil)-butánsav bevezetésével módosítottuk és ennek hatását vizsgáltuk a tumor- és a vesefelvételre in vivo PET képzéssel és ex vivo biodisztribúcióval.

A kémiai szintézis során a gyantához kapcsolt védőcsoportokkal ellátott NAPamid molekulához egy megfelelően védett lizint kapcsoltunk. Ezt követően az Fmoc védőcsoportot eltávolítottuk és 4-(p-jód-fenil)-butánsavval konjugáltunk. A Dde védőcsoport eltávolítása után DOTA-trisz(t-Bu)észtert kapcsoltunk a peptidhez. Triflur-ecetsavas kezelés után nyertük a prekursor molekulát, amelyet semipreparatív HPLC-vel tisztítottuk és szerkezetét tömegspektroszkópiával igazoltuk. Az így kapott NAPamid származékot ciklotronban előállított  $^{68}\text{Ga}$ , valamint  $^{205/206}\text{Bi}$  izotópokkal jelöltük. A  $^{213}\text{Bi}$  izotóp limitált elérhetősége miatt  $^{205/206}\text{Bi}$  izotópot használtunk az előzetes preklinikai vizsgálatokhoz. A jelölt vegyületeket szilárdfázisú extrakcióval tisztítottuk. Elvégeztük a tisztított vegyületek szérum, EDTA és fém stabilitás vizsgálatát. Az in vivo és ex vivo vizsgálatok során C57B16 egereket és B16F10 sejtvonalat használtunk. A  $^{68}\text{Ga}$  izotóppal jelzett radiofarmakon esetében szervi megoszlás vizsgálatot és PET felvételt készítettünk, míg a  $^{205/206}\text{Bi}$  izotópokkal jelzett radiofarmakon esetében csak szervi megoszlás történt.

Sikeresen előállítottunk és  $^{68}\text{Ga}$ , valamint  $^{205/206}\text{Bi}$  izotópokkal radiojeleztünk egy 4-(p-jód-fenil)-butánsavval módosított DOTA-konjugált NAPamid származékot. A tisztított jelölt vegyületek radiokémiai tisztasága nagyobb volt, mint 98%. A szérumstabilitás vizsgálatok során négy óra után sem tapasztaltunk jelentős változást a komplexek stabilitásában. A preklinikai vizsgálatok még folyamatban vannak, de az előzetes eredmények alapján azt mondhatjuk, hogy az albuminkötő egység bevezetése növelte a tumorfelvételt és csökkentette a vesefelvételt, ezek előnyösek a radioterápia számára. Ugyanakkor meg kell jegyeznünk, hogy a radiotracerek injektálása után 90 perccel a vérben szervek radiofarmakon felvétele is jelentős volt még a megnövekedett keringési idő miatt.

## Különbéle ligandumokat és oxidálóanionokat tartalmazó vas(III)-komplex sók szintézise, szerkezete és tulajdonságai

*Béres Kende Attila<sup>a,b</sup>, Homonnay Zoltán<sup>a</sup>, Kótai László<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Magkémiai Laboratórium

<sup>b</sup> ELKH TTK, Anyag- és Környezatkémiai Intézet, Plazmakémiai Kutatócsoport

e-mail: beres.kende.attil@ttk.hu

Munkám során különféle ligandumokat (karbamid, dimetilkarbamid) és oxidálóanionokat ( $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{MnO}_4^-$ ,  $\text{ClO}_4^-$ ) tartalmazó vas(III)-komplex sók előállításával, szerkezetvizsgálatával foglalkoztam – hasonlóan korábbi átmenetifém-komplexekkel foglalkozó kutatásainkhoz [1-3]. Tanulmányoztam a komplexek redukáló ligandumja és oxidáló anionjai közötti termikusan indukált kvázi-intramolekuláris redoxi reakciókat is. Az előállított komplexeket por- és egykristály-röntgendiffrakció, Mössbauer-, infravörös és Raman-spektroszkópiái, valamint termikus analízis módszerek segítségével jellemeztem. A komplexek felépítése és tulajdonságai (pl. Debye-hőmérséklet) a ligandumok méretétől és szerkezetétől függenek, különös tekintettel a kiterjedt, erős  $\text{N-H}\cdots\text{O-X}$  ( $\text{X} = \text{N}, \text{Mn}, \text{Cl}$ ) típusú hidrogénhid-kötésekre. Tanulmányoztam a hexakarbamid-vas(III)-permanganát hőkezelése során lejátszódó folyamatokat és a bomlástermékek összetételét. Már alacsony hőmérsékleten ( $\sim 100^\circ\text{C}$ ) különféle mikrokristályos vas-mangán vegyes oxidok keletkeztek. A Palacký University-vel (Olomouc, Csehország) együttműködésében a kapott vegyes oxidok katalitikus tulajdonságait a  $\text{CO}_2$  hidrogénezésénél vizsgáltuk. Ezek közül több aktívnak bizonyult, változó szelektivitással és konverzióval  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$  és  $\text{C}_3\text{H}_8$  keletkezett.

- [1] G.B. Kovacs, N.V. May, P.A. Bombicz, S. Klébert, P. Németh, A. Menyhárd, G. Novodárszki, V. Petrusovski, F.P. Franguelli, J. Magyar, K. Béres, I.M. Szilágyi and L. Kótai, *RSC Advances*, **2019**, *9*, 28387.
- [2] L. Fogaca, K. Éva, G. Németh, K. Kamarás, K.A. Béres, P. Németh, V. Petruševski, L. Bereczki, B. Barta-Holló, I.E. Sajó, S. Klébert, A. Farkas, I.M. Szilágyi, L. Kótai, *Inorg. Chem.*, **2021**, *60*, 3749
- [3] K.A. Béres, I.E. Sajó, Gy. Lendvay, L. Trif, V.M. Petruševski, B. Barta-Holló, L. Korecz, F.P. Franguelli, K. László, I.M. Szilágyi and L. Kótai, *Molecules*, **2021**, *26*, 4022

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatást az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

## Új típusú Cu(II)-komplexek radioteranosztikai alkalmazásokhoz II.

Kálmán-Szabó Ibolya<sup>a</sup>, Bunda Szilvia<sup>b</sup>, Szaniszló Zsófia<sup>b</sup>, Lihi Norbert<sup>c</sup>, P. Szabó Judit<sup>a</sup>,

Szikra Dezső<sup>a</sup>, Trencsényi György<sup>a</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>b</sup>

<sup>a</sup> DE, ÁOK, Nukleáris Medicina Nem Önálló Tanszék, 4032 Debrecen, Nagyerdei krt. 98.

<sup>b</sup> DE, TTK, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

<sup>c</sup> DE, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

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

A mai napig a modern rákgyógyítás alapját a prevenció és a korai diagnosztika adja. Hiába a több évtizedes kutatás, a tumoros betegségek változatossága megnehezíti és tulajdonképpen lehetetlenné teszi egy egységes terápiás módszer kialakítását. A korai diagnosztika egyik hatásos eszköze a pozitron emissziós tomográfia (PET, amely a tumoros elváltozásokat, már korai stádiumban képes kimutatni. A PET legelterjedtebben alkalmazott radiodiagnosztikuma az FDG (fluoro-deoxi-glükóz), amely a <sup>18</sup>F-izotópot tartalmazza kovalensen kötött formában. Értelemszerűen egy szerves kémiai reakciót is magában foglaló kontrasztanyag előállításnál kedvezőbb lenne olyan diagnosztikumokat fejleszteni, amelyekben például komplexképzéssel megoldható az izotóp megkötése. Erre a célra alkalmasak a pozitron sugárzó fémionok, például a réz <sup>64</sup>Cu-izotópja is ( $t_{1/2}=12,7$  óra,  $\beta^+$  18%,  $\beta^-$  39%, Auger elektronok), amelyet a megfelelő kelátorral komplexálva nemcsak diagnosztikai, de terápiás célból is alkalmazni lehet. A radioizotópok (főleg a rövid felezési idejűek) komplexálása még savas közegben is gyors kell hogy legyen a diagnosztikai és terápiás hatás megőrzése érdekében. Korábban részletesen tanulmányoztuk a biciklusos 1,4,7,10,13-pentaazabiciklo{8.5.2}heptadekán ligandumot és bifunkciós *para*-nitrobenzil linkerrel ellátott származékát és azt találtuk, hogy azok megfelelő tulajdonságokkal rendelkeznek a klinikai alkalmazás szempontjából.<sup>1</sup> Az *in vivo* kísérletek kapcsán azonban kiderült, hogy a nitrobenzilcsoport redukciója, amely a targetáláshoz elengedhetetlen, nehezen kivitelezhető, így azt benzoészav csoporttal helyettesítettük. Az így kapott ligandum Cu(II)-komplexe is hasonlóan jó tulajdonságokkal rendelkezik, valamint az *in vivo* kísérletek bebizonyították, hogy diagnosztikai potenciálja is kiváló.

[1] Csupász, T.; Lihi, N.; Fekete, Z.; Nagy, A.; Botár, R.; Forgács, V.; Szikra, D.; May, N.V.; Tircsó, G.; Kálmán, F.K., *Inorg. Chem. Front.*, **2022**, 9 (6), 1217–1223.

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönetüket fejezik ki az anyagi támogatásért a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) FK-134551 pályázatának, továbbá a Bolyai János Kutatási Ösztöndíjnak (K.F.K.), valamint az ÚNKP-21-5 (K.F.K.) és ÚNKP-21-4-II (L.N.) ösztöndíjaknak.

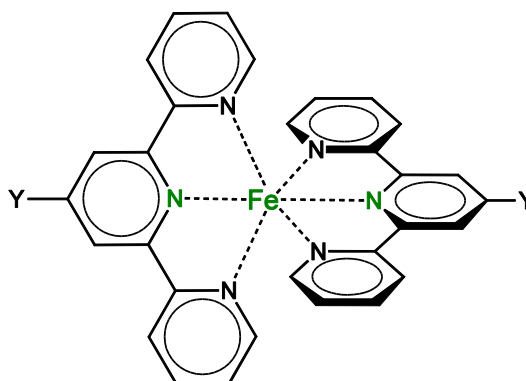


## Újratervezett funkcionális molekulák: ultragyors dinamika kísérleti és elméleti szemmel

*Németh Zoltán, Bajnóczi Éva G., Bazsó Gábor, Bogdán Csilla, Keszthelyi Tamás,  
Papp Mariann, Pápai Máttyás, Rozgonyi Tamás, Sárosiné Szemes Dorottya,  
Vancza Andor, Vankó György*

Wigner Fizikai Kutatóközpont, 1121 Budapest Konkoly-Thege M. u. 29-33  
e-mail: nemeth.z@wigner.hu

A fényaktivált funkcionális molekulák számos technológiai problémára (az IT-től a fenntartható fejlődésig) megoldást jelenthetnek, így ezek molekuláris tervezéssel való fejlesztése kiemelt szerepet játszik a modern koordinációs kémiában. Az átmenetifém-komplexek (különösen polipiridin ligandumokkal) a legígéretesebb jelöltek közé tartoznak, mivel tulajdonságaik a ligandumok elektron- és molekulaszerkezetének változtatásával a molekuláris kapcsolóktól a fotoszenzibilizátorokéig hangolhatók. A hatékony funkcionális molekulák fejlesztésének kulcsa a komplexek potenciális energiafelületeinek (PES) alapos megértése, majd a molekulák újratervezése, hogy a relaxációs útvonalat a kívánt funkcióhoz optimális irányba módosítsák. Az előadás során rövid betekintést adunk kutatócsoportunk ezirányú törekvéseibe, a szélső gyűrűn helyettesített vas-terpiridin komplex példáján bemutatva az elmélet és a modern kísérleti módszerek egymást támogató munkáját.



**1. ábra:** A  $[\text{Fe}(4'\text{-Y-}2,2':6',2''\text{-terpyridine})_2]^{2+}$  komplex szerkezeti sémája.

- [1] Vankó, Gy, *et al.*, *J. Phys. Chem. C*, **2015**, *119*, 5888.  
[2] Kunnus, K, *et al.*, *Nat. Comm.*, **2020**, *11* 634.  
[3] Sárosiné, Szemes D, *et al.*, *ChemComm*, **2020**, *56* 11831.

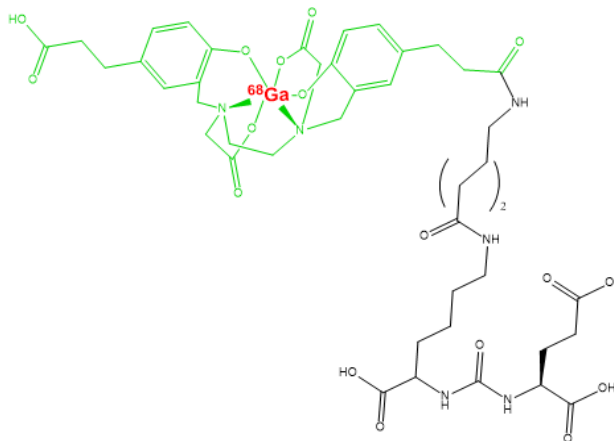
## A [<sup>68</sup>Ga]Ga-PSMA-11 tartalmú radiogyógyszer klinikai vizsgálati engedélyeztetése

Varga Flóra, Farkasinszky Gergely, Ésik Zsuzsanna, Dénes Noémi, Kertész István,  
Miklovicz Tünde, Németh Enikő, Rubleczky Béla, Pótári Norbert, Trencsényi György,  
Forgács Viktória, Jószai István

Debreceni Egyetem Klinikai Központ Orvosi Képző Kórház Nukleáris Medicina  
e-mail: joszai.istvan@med.unideb.hu

A prosztatarák a férfiak második leggyakoribb daganatos megbetegedése. A primer tumorok, recidívák és kiújulások korai diagnosztizálása alapvető jelentőségű a hatékony terápia megtervezése szempontjából. A pozitronemissziós tomográfia (PET) sikeresen alkalmazható ebből a célból, amellyel már a molekuláris szintű elváltozások észlelhetők. A prosztatarák PET vizsgálatához a <sup>68</sup>Ga izotóppal jelzett prosztataspecifikus membrán antigén ligandumok (PSMA) alkalmasnak bizonyultak. A komplex vegyületek szelektíven kötődnek a daganatos sejteken expresszálandó transzmembrán fehérjékhez, ezzel lehetővé téve a kóros területek leképezését.[1]

A Debreceni Egyetem Orvosi Képző Kórházában kifejlesztésre került a [<sup>68</sup>Ga]Ga-PSMA-11 tartalmú radiogyógyszer egy nemzetközi gyógyszeripari szponzor megbízásából. A steril injekciós készítmény gyártása tisztatéri körülmények között valósul meg a hatályos Európai Gyógyszerkönyvi előírások alapján.[2] A radioaktív készítmény gyógyszerfejlesztés céljából kerül felhasználásra humán fázis III klinikai vizsgálatok keretében. Az előadás célja a gyógyszerengedélyeztetés menetének bemutatása azon készítmények esetén, amelyek hatóanyaga a nukleáris medicinában alkalmazható radiofémek komplex vegyületei.



[1]Tschelidis I and Vrachimis A, *Front. Oncol.*, **2022**, *12*, 831429.

[2]European Pharmacopeia Monograph “Gallium 68 PSMA-11 Injection Solution” (04/2021:3044).  
European Pharmacopeia, 10th Edition. **2020**.

## Galektin-3 receptor detektálása melanoma sejtekben <sup>68</sup>Ga-jelzett (2-naftil)metilezett laktóz-amin alapú radioligandokkal.

*Gyuricza Barbara<sup>a,b</sup>, Szűcs Ágnes<sup>a</sup>, P. Szabó Judit<sup>a,c</sup>, Arató Viktória<sup>a,d</sup>, Szűcs Dániel<sup>a,b</sup>, Szikra Dezső<sup>a</sup>, Trencsényi György<sup>a</sup>, Fekete Anikó<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, ÁOK Orvosi Képző Intézet Nukleáris Medicina Tanszék

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Kémiai Tudományok Doktori Iskola

<sup>c</sup> Debreceni Egyetem, Klinikai Orvostudományok Doktori Iskola

<sup>d</sup> Debreceni Egyetem, Gyógyszerésztudományi Doktori Iskola

e-mail: gyuricza.barbara@med.unideb.hu

A galektin-3 (Gal-3) a lektinek családjába tartozik és felismeri a glikokonjugátumokban található  $\beta$ -galaktozidokat. A Gal-3 elősegíti a tumorok progresszióját [1], ezért a Gal-3 pozitív daganatok (pl. melanoma) prognosztikus és diagnosztikus markerének tekinthető [2]. A Gal-3 egyik liganduma a laktózin, melynek affinitása a galaktóz egység C-3' pozíciójába kialakított aromás szubsztituenssel növelhető [3]. A kutató munka célja olyan radiofarmakon szintézise, mely kimutatja a Gal-3 receptort overexpresszáló daganatokat PET képalkotással. A tumorfelvételének növelése céljából előállítottunk egy heterodimert is, amely egyaránt képes kötődni a Gal-3, valamint az  $\alpha_v\beta_3$  integrinhez. Az  $\alpha_v\beta_3$  integrin sejtadhéziós fehérjék, melyek jelentős szerepet töltenek be az angiogenezisben és az áttétképzésben. Detektálásuk az Arg-Gly-Asp (RGD) tripeptid szekvenciát tartalmazó peptid analógokkal lehetséges.

A kutatás során sikeresen megvalósítottuk a (2-naftil)metil csoport kialakítását, a kapott laktózin kapcsolását a p-SCN-Bn-DOTAGA kelátorhoz, a cRGDFK peptid konjugálását klick reakcióval és az előállított prekursorok radiokémiai jelzését <sup>68</sup>Ga izotóppal. Meghatároztuk a jelzett vegyületek log*P* értékeit, mely alapján mindhárom radiogyógyszer hidrofil. A B16F10 egér melanoma sejtekkel subcután injektált C57BL/6 egereken végzett *in vivo* miniPET vizsgálatok igazolták, hogy az előállított radiofarmakonok alkalmasak a B16F10 melanoma kimutatására, amelyet az *ex vivo* biodistribúciós vizsgálatok is megerősítettek.

[1] Danguy, A.; Camby, I.; Kiss, R.; *Biochim. Biophys. Acta* **2002**, *1572*, 285–293.

[2] Comodo, A.N.; Bachi, A.L.L.; Soares, et al.; *Adv. Biosci. Biotechnol.* **2013**, *4*, 55–62.

[3] van Hattum; H, Branderhorst H. M., et. al.; *J Med. Chem.*, **2013**, *56*, 1350-1354.

**Komplexbizonyos neodímium-, kalcium- és glükonátionokat tartalmazó vizes oldatokban, pH = 2 és 14 között**

*Kutus Bence<sup>a</sup>, Böszörményi Éva<sup>a</sup>, Peintler Gábor<sup>b</sup>, Sipos Pál<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged, Dóm tér 7.

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szeged, Rerrich Béla tér 1.

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

A radioaktív hulladék tárolásának egyik módja földalatti beton alapú tárolókban történő elhelyezés. A cement magas sótartalmú bányavíz okozta degradációja során kialakuló pórusvíz erősen lúgos és magas kalciumtartalmú lehet [1], emellett kisebb-nagyobb mennyiségben szerves szennyezőket tartalmazhat [2]. A radioaktív fémionok egyensúlyi oldhatóságát – ami a tárolók hosszútávú biztonsági elemzése szempontjából kiemelt fontosságú – döntően befolyásolják az oldatfázisban lejtászódó komplexképződési folyamatok. Ezen reakciók teljeskörű megértéséhez fontos mind az aktinoida fémion és szerves ligandum között képződő biner, mind a kalciumion részvételével képződő terner komplexek összetételének és stabilitásának meghatározása.

Kutatócsoportunkban az elmúlt években a neodímium(III)-glükonát, valamint a kalcium(II)-neodímium(III)-glükonát rendszerekben lezajló egyensúlyi folyamatokat tanulmányoztuk a teljes pH-tartományban (2–14), 1 illetve 4 M ionerősség mellett (NaCl). (A neodímiumion a +3-as oxidáció állapotú aktinoidák, míg a glükonát a szerves ligandumok gyakori modellje.) Eredményeink alapján modellszámításokat végeztünk a neodímium-hidroxid oldhatóságára vonatkozóan, glükonát jelenlétében. Az egyensúlyi állandók meghatározásán túl vizsgáltuk a glükonátion karboxilát- és OH-csoportjainak fémionok koordinációjában betöltött szerepét, valamint az esetlegesen leváló szilárd fázisok összetételét is.

[1] C. Bube, V. Metz, E. Bohnert, K. Garbev, D. Schild, B. Kienzler, *Physics and Chemistry of the Earth*, **2013**, *64*, 87–94.

[2] H. Rojo, X. Gaona, T. Rabung, R. Polly, M. García-Gutierrez, T. Missana, M. Altmaier, *Applied Geochemistry*, **2010**, *126*, Paper 104864.

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

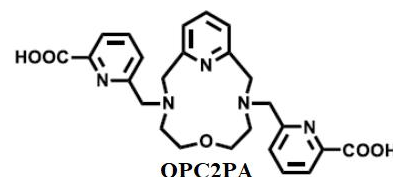
## Egy merevített makrociklusos pikolinátszármazék ritkaföldfém(III)- komplexei: előállítás és koordinációs kémiai jellemzés

*Lakatos Gergő, Csupász Tibor, Tircsó Gyula*

Debreceni Egyetem, TTK, Fizikai Kémia Tanszék, Ritka(föld)fém Kutatócsoport

e-mail: 99lakatosgergo@gmail.com

Az MRI kontrasztanyagok jelenlegi generációjának alkalmazhatóságával kapcsolatban tapasztalt biztonsági aggályok miatt nagy társadalmi igény mutatkozik ilyen célra használható, kedvezőbb fizikokémiai jellemzőkkel bíró, Gd(III)-komplexekre [1,2]. Munkánk során egy olyan merev makrociklusos oktaedént kelátort (OPC2PA) állítottunk elő, melyben a Gd(III)-ion komplexálására korábban már alkalmasnak bizonyult, két pikolinátcsoportot tartalmazó 3,9-PC2PA anyaligandum nem helyettesített N-atomját oxigénatomra cseréltünk [3]. Ez a változtatás korábban sikeres stratégiának bizonyult Mn(II)-kötő ágensek disszociáció-kinetikai paramétereinek javítására[4].



A  $[Gd(OPCPA)]^+$  termodinamikailag stabil ( $\log K_{GdL} = 17,77$ ) és a látszólagos stabilitása felülmúlja a piklén-alapú anyavegyület komplexére jellemző értéket ( $pGd = 18,7$  vs.  $17,8$ ). A  $[Gd(OPCPA)]^+$ -komplex 25 és 37 °C-on is jelentős relaxivitással bír, mely a Gd(III)-ion belső koordinációs szférájában található vízmolekula jelenlétével magyarázható. A komplex inertségét savasszisztált disszociációs reakciókban vizsgáltuk. Meglepő módon, a  $[Gd(OPCPA)]^+$ -kelát disszociációjára jellemző kinetikai paraméterek romlanak az anyavegyület Gd(III)-komplex esetében tapasztaltakhoz képest. Ezen tapasztalat magyarázata feltehetően a kelát koordinációs geometriában keresendő, amelyre DFT számolásokkal próbálunk kézzelfogható magyarázatot találni.

[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] G. Nizou, E. Molnár, N. Hamon, F. K. Kálmán, O. Fougère, O. Rousseaux, D. Esteban-Gómez, C. Platas-Iglesias, M. Beyler, Gy. Tircsó, R. Tripier, *Inorg. Chem.*, **2021**, *4*, 2390-2405

[4] T. Csupász, D. Szücs, F. K. Kálmán, O. Hollóczki, A. Fekete, D. Szikra, É. Tóth, I. Tóth, Gy. Tircsó, *Molecules*, **2022**, *2*, 371

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők hálásak a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal által nyújtott anyagi támogatásáért (az NKFIH K-134694 számú projektnek). A kutatás az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-1-I Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával valósult meg.

**A tau fehérje két kötőhelye (His32 és His329-330) fémionkötő képességének összehasonlítása**

*Balogh Bettina Diána, Várnagy Katalin*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: balogh.bettina@science.unideb.hu

A neurodegeneratív taupátiákat magukba foglaló demenciák és mozgásszervi zavarok egyik jellemzője az abnormális tau-filamentumok intracelluláris felhalmozódása. Ebben a folyamatban a fémionok fontos szerepet játszhatnak, hiszen előidézhetik a fehérje aggregációját. Korábbi vizsgálataink [1-3] arra utalnak, hogy a fiziológiás pH-tartományban a His32 imidazolnitrogén kedvezőbb kötőhelyet jelent a Cu(II)-ionok számára az R3-régió két szomszédos hisztidil-oldalláncánál. A kétféle környezetben található hisztidinek fémionmegkötő képességének összehasonlítása érdekében a His32 és a His329-330 kötőhelyeket egyaránt tartalmazó, Ac-TMHQDNIHHKP-NH<sub>2</sub> szekvenciájú peptid oldategyensúlyi folyamatait vizsgáltuk Cu(II)-, Zn(II)-, illetve Cu(II)/Zn(II)-ionok jelenlétében.

A Cu(II)-ionok jelenlétében képződő egymagvú komplexekben a His32 kémiai környezetét modellező imidazolil-oldallánc jelenti az elsődleges – bár nem kizárólagos – kötőhelyet a fémion számára. Fémionfelesleg alkalmazása esetén két-, sőt hárommagvú részecskék is kialakulnak.

Zn(II)-ionokat tartalmazó oldatban a fémion koordinációja feltehetően a két szomszédos hisztidin valamelyikéről indul el és a pH emelésével, bázikus oldatban amidkötött komplexek képződnek.

A fentiekkel összhangban, a kétfémes rendszerben is az N-terminális hisztidil-oldallánc jelenti az elsődleges horgonycsoportot a Cu(II)-ionok számára, így a Zn(II)-ionok csak a karboxiterminus két szomszédos hisztidinjének valamelyikéhez kötődhetnek.

- [1] M. Lukács, Gy. Szunyog, Á. Grenács, N. Lihi, Cs. Kállay, G. Di Natale, T. Campagna, V. Lanza, G. Tabbi, G. Pappalardo, I. Sóvágó, K. Várnagy, *ChemPlusChem*, **2018**, 84, 1697-1708
- [2] B.D. Balogh, B. Szakács, G. Di Natale, G. Tabbi, G. Pappalardo, I. Sóvágó, K. Várnagy, *Journal of Inorganic Biochemistry*, **2021**, 217, 11358
- [3] B.D. Balogh, Gy. Szunyog, M. Lukács, B. Szakács, I. Sóvágó, K. Várnagy, *Dalton Transactions*, **2021**, 50, 14411-14420

## Fémkötő helyek fehérjékben

Hajdu Bálint<sup>a</sup>, Nafae H. Zeyad<sup>a</sup>, Hunyadi-Gulyás Éva<sup>b</sup>, Gyurcsik Béla<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Szegedi Biológiai Kutatóközpont, Proteomikai Kutatólaboratórium

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

A fehérjékben számos aminosav oldallánc koordinálódhat fémionokhoz. Amennyiben a fehérje természetes szerkezetében több ilyen oldallánc a fémionok számára kedvező térbeli elrendeződést alakít ki, nagy affinitású, fémion-specifikus kötőhelyek jöhetnek létre. Ilyen szerkezetek figyelhetők meg számos metalloenzim aktív központjában. A colicin E7 nukleáz doménje jó példa arra, hogy a fehérje természetes szerkezetében a három hisztidin oldallánchoz kapcsolódó cinkion jóval erősebb kölcsönhatást alakít ki, mint a réz(II)ionok, miközben a szintén három hisztidint tartalmazó peptidmolekulák fémion-affinitása fordított sorrendet követ. Új fémkötő helyek beépítésével az ilyen fehérjékbe azok funkciója is befolyásolható [1]. A meghatározott feltekeredési mintázattal rendelkező, természetes formájukban fémiont nem tartalmazó fehérjék is képesek lehetnek fémion(oka)t megkötni aminosav oldalláncaikon keresztül. Ilyenkor a fehérje szerkezete nem változik lényegesen, de tulajdonságai és funkciója is módosulhat. A TEM-1  $\beta$ -laktamáz enzim tisztítása Ni(II)-affinitás kromatográfia alkalmazásával a fehérje felszínén található hisztidin oldalláncoknak köszönhetően valósult meg [2]. Ugyanakkor, bizonyos fémkötő funkcióval bíró fehérjék szerkezete rendezetlen, és csak a fémionokkal kialakított kölcsönhatás következtében jön létre funkcionális szerkezet. Jó példái ennek a cinkujj fehérjék, melyek esetében esszenciális, hogy az endogén fémionnal kellően stabilis komplex jöjjön létre. Az egyéb fémionok megkötődése ugyanis a természetestől eltérő fehérjeszerkezetek kialakulását eredményezi. Az Ag(I) ion a C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> kötőhellyel rendelkező cinkujjak szerkezetét a fémion:fehérje molaránytól függően változtatja meg [3].

[1] H.A.H. Abd Elhameed, B. Hajdu, A. Jancsó, A. Kéri, G. Galbács, É. Hunyadi-Gulyás, B. Gyurcsik, *J. Inorg. Biochem.*, **2020**, 206, 111013.

[2] Z.H. Nafae, É. Hunyadi-Gulyás, B. Gyurcsik, *Protein Expr. Purif.*, **2022**, benyújtva

[3] K. Kluska, G. Veronesi, A. Deniaud, B. Hajdu, B. Gyurcsik, W. Bal, A. Krężel, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, e202116621.

**Köszönetnyilvánítás:** A projektet támogatták: GINOP-2.3.2-15-2016-00038, NKFIH K\_16/120130, 2019-2.1111-TÉT-2019-00089.

**A rákellenes VLX600 vaskelátor endogén fémionokkal való  
kölsönhatásának oldatkémiai vizsgálata**

*Pósa Vivien<sup>a</sup>, Tusa László Gy.<sup>a</sup>, Spengler Gabriella<sup>a,b</sup>, May Nóra Veronika<sup>c</sup>,*

*Christian R. Kowol<sup>d</sup>, Enyedy Éva Anna<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> SZTE, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport

<sup>b</sup> SZTE, Szent-Györgyi Albert Orvostudományi Kar, Orvosi Mikrobiológiai Intézet

<sup>c</sup> ELKH, Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ

<sup>d</sup> University of Vienna, Institute of Inorganic Chemistry

e-mail: [posa.vivien@chem.u-szeged.hu](mailto:posa.vivien@chem.u-szeged.hu)

A daganatos megbetegedések világszerte a leggyakoribb halálokok között szerepelnek, azonban a forgalomban lévő kemoterápiás szerek szinte mindegyikének jelentős mellékhatásai vannak. A VLX600 egy klinikai tesztelés alatt álló rákellenes, vaskelátorként számontartott vegyület, melynek biológiai aktivitásában feltehetően a fémionokkal való kölcsönhatás is szerepet játszik [1]. Ennek megfelelően nemcsak a VLX600 farmakokinetikai viselkedését befolyásoló, alapvető fizikai-kémiai tulajdonságainak megismerése szükséges, hanem az esszenciális fémionokkal való komplexképzésének jellemzése is, különös tekintettel a vasionokra.

Munkánk elsődleges célja a nitrogén donoratomokat tartalmazó VLX600 kelátképző vegyület előállításával mellett annak oldatkémiai vizsgálata, azaz proton disszociációs állandók, membrán permeabilitás és lipofilitás meghatározása, humán szérum albuminhoz való kötődésének, és endogén fémionokkal (pl. a  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ) képzett komplexeinek oldatbeli stabilitásának és szerkezetének jellemzése. A képződő komplexek összetételét UV-látható spektrofotometriás és ESR titrálások révén határoztuk meg, továbbá a redoxi potenciálok meghatározása céljából ciklikus voltametriás ill. spektroelektrokémiai méréseket is végeztünk a vas-, és rézkomplexek esetén.

[1] M. Fryknás, X. Zhang, U. Bremberg et. al. *Scientific Reports*, **2016**, *6*, 38343.

**Köszönetnyilvánítás:** A munka a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatásával készült az ÚNKP-21-3-SZTE-455 (P.V.) és a magyar-osztrák 2019-2.1.11-TÉT-2019-00003 pályázatokon keresztül.



## Sav-aktiválta rákellenes félszendvics komplexek előállítására és oldatkémiai vizsgálata

*Mészáros János P.<sup>a</sup>, Spengler Gabriella<sup>a,b</sup>, Alexander Prado-Roller<sup>c</sup>, Wolfgang Kandioller<sup>c</sup>,  
Bernhard K. Keppler<sup>c</sup>, Enyedy Éva Anna<sup>a</sup>*

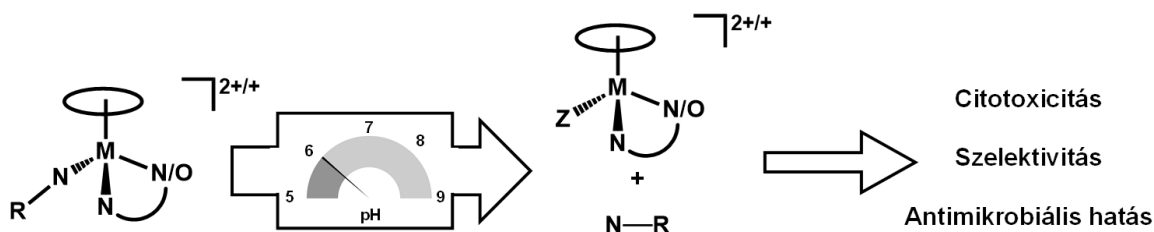
<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szent-Györgyi Albert Klinikai Központ és Szent-Györgyi Albert Orvostudományi Kar, Orvosi Mikrobiológia Intézet

<sup>c</sup> University of Vienna, Institute of Inorganic Chemistry

e-mail: meszaros.janos@chem.u-szeged.hu

A klinikumban használt rákellenes fémkomplexek egyik legnagyobb problémája a kezelése során fellépő súlyos mellékhatás, mely a nem elégséges szelektivitásból ered [1]. A félszendvics geometriájú ruténium- és ródiumkomplexek számos képviselője kitűnő rákellenes hatást mutatott *in vitro*, azonban az egészséges sejtekkel szembeni szelektivitásuk nem minden esetben volt megfelelő [2]. Ebben az előadásban olyan Rh(III)-komplexek előállítását és oldategyensúlyi folyamatait mutatjuk be, melyek enyhén savas közegben részben disszociálnak és így aktiválódnak. Ezeket a megfelelő Ru(II)-analógokkal is összehasonlítjuk. A rákos szövet elsavasodása következtében ezeknek a komplexeknek akár számottevő szelektivitása is lehet. Ezért a komplexek citotoxikus hatását megvizsgáltuk Colo205 és Colo320 rákos sejteken, illetve különböző baktériumtörzseken, savas és semleges pH-n is.



[1] R. Oun, Y. E. Moussa, N. J. Wheate, *Dalton Transactions*, **2018**, 47, 6645–6653.

[2] E. Zanda, N. Busto, L. Biancalà, S. Zacchini, T. Biver, B. Garcia, F. Marchetti, *Chemico-Biological Interactions*, **2021**, 344, nr.: 109522

**Köszönetnyilvánítás:** Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (FK 124240, TKP-2021-EGA-32) és az Eötvös Lóránd Kutatási Hálózat (LP2019-6/2019)

## 8-Oxikinolinátcsoportot tartalmazó makrociklusos ligandumok előállítása és koordinációs kémiai jellemzése

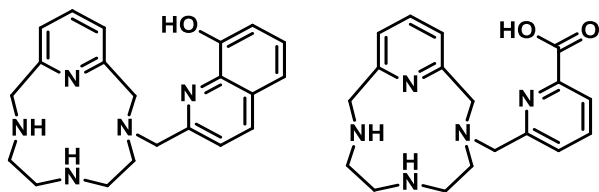
*Kapus István<sup>a,b</sup>, Csupász Tibor<sup>a</sup>, Váradi Balázs<sup>a,b</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Kémiai Tudományok Doktori Iskola

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

A mágneses rezonanciás képalkotás (MRI) az egyik legdinamikusabban fejlődő neminvazív diagnosztikai módszer a modern orvostudományban. A klinikai vizsgálatok jelentős részében a kívánt képminőség/kontraszt biztosításához ún. kontrasztanyagokat használnak. A forgalomban lévő Gd(III)-alapú MRI kontrasztanyagokba vetett bizalom az utóbbi években megrendült, amit az egyes komplexekből felszabaduló toxikus Gd(III)-ion számlájára írható. Az alternatív megoldást kínáló, az emberi szervezet által jobban tolerált, paramágneses esszenciális fémionok közül a legintenzívebb kutatás a Mn(II)- és Fe(III)/Fe(II)- ionok kelátjait célozza. Ezen fémionok komplexálására alkalmas ligandumok köre folyamatosan bővül. A 8-hidroxikinolin egy jól ismert kétfogú ligandum<sup>[1]</sup>, amelyet oldalláncként alkalmazva merevvázú (piklén) makrociklusos kelátort állítottunk elő (3-PCOX) és vizsgáltuk a ligandum Mg(II), Ca(II), Mn(II), Cu(II) és Zn(II)-ionokkal képződő komplexei oldategyensúlyát, meghatároztuk a [Mn(3-PCOX)]<sup>+</sup>-komplex relaxivitását és vizsgáltuk a Cu(II)/Zn(II)-ionokkal lejátszódó cserereakciók kinetikáját. Az eredményeink azt mutatják, hogy 3-PCOX komplexei a pikolinát (3-PCPA) kelátokkal mutatnak hasonlóságot, de komplexek stabilitása nagyobb a ligandum megnövekedett bázicitásának (fenolos OH-csoport) köszönhetően. Relaxometriás méréseink alapján monoakvált Mn(II)-komplex képződik a 3-PCOX ligandummal, amelyben az OH-csoportja kis pH-n protonált (pK=5,93(2)) és így a komplex a belsősférás hatáson túl, protoncserén keresztül is képes relaxációs hatást kifejteni.



1. ábra: A 3-PCOX és 3-PCPA ligandumok szerkezeti képlete.

[1] Wang, X. J: et al. *Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 15487-15500.

**Köszönetnyilvánítás:** A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) 134694 sz. pályázata, valamint az Innovációs és Technológia Minisztérium Kooperatív Doktori Program Doktori Hallgatói Ösztöndíj Programja támogatta. Az ismertetett tudományos eredmények a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Richter Gedeon Talentum Alapítvány támogatásával, „Richter Talentum PhD. ösztöndíj” keretében készültek.

## Angiográfias vizsgálatokhoz tervezett makrociklusos Mn(II)-komplex előállítás és jellemzése

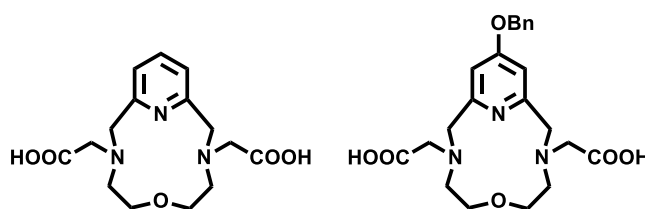
*Csupász Tibor, Tóth Imre, Tircsó Gyula*

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

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

A mágneses rezonanciás angiográfia (MRA) neminvaszív módon nyújt információt az emberi szervezet érrendszeréről, a módszer érzékenysége pedig kontrasztanyagok (CA) alkalmazásával javítható. A „blood-pool” KA-k működése abban rejlik, hogy a beinjektálásukat követően nem kovalensen kötődnek a Humán Szérum Albumin (HSA) fehérjéhez, melynek eredményeként a keletkező adduktum relaxivitása lényegesen megnő a komplex relaxációnövelő hatásához képest. Jelenleg az irodalomban Gd(III)- és Mn(II)-iont tartalmazó komplexeket javasolnak „blood-pool” ágensekként [1,2], melyek közül az MS-325 komplexet MRA ágensként alkalmazzák.[3]

A legutóbbi kutatásaink alapján a oxotriaza-biciklopentadeka-trién (O-piklén) vegyületcsalád nagy stabilitású komplexet képeznek a Mn(II)-ionnal, melyek inertsége és relaxációs tulajdonságai is megfelelnek az alkalmazásokhoz.[4] Az OPC2A makrociklusból kiindulva a kutatócsoportunkban olyan Mn(II)-komplex előállítását sikerült megvalósítani ([Mn(13-OBn-OPC2A)]), melynek benzilcsoportja képes a HSA fehérjével kölcsönhatást kialakítani. Az előadásom során a 13-OBn-OPC2A kelátor előállítását (1. ábra), a [Mn(13-OBn-OPC2A)]-komplex fizikai-kémiai jellemzését és a HSA fehérjével való kölcsönhatás mértékének a vizsgálatát bemutató eredményeinket tervezem ismertetni.



1. ábra. Az OPC2A és a 13-OBn-OPC2A szerkezete

- [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] Randall B. Laufer, et. al.; *Radiology*, **1998**; *207*, 529-538  
 [4] T. Csupász, et. al.; *Molecules*, **2022**, *27*(2), 371

**Köszönetnyilvánítás:** A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K- 134694, valamint a 2019-2.1.11-TÉT-2019-00084 sz. pályázatai támogatták.

### Az oldalláncok szerepe a SOD enzimet modellező peptidek komplexképző sajátságaira

*Székely Enikő, Várnagy Katalin*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

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

A peptidek nagy fémionkötő affinitással rendelkeznek, de mind a peptidkomplexek termodinamikai stabilitását, mind koordinációs geometriáját jelentősen befolyásolja a ligandumok aminosav szekvenciája. A metalloproteinekben a hisztidin imidazolil csoportja gyakori donorcsoport és az átmeneti fémionok legfontosabb kötőhelye. Az ilyen fémion-fehérje kölcsönhatás szerepet játszik például a Cu,Zn-szuperoxid-dizmutáz enzim működésében. Kutatócsoportunkban korábban vizsgáltak olyan peptideket, amelyek a Cu,Zn-SOD enzim aktív centrumában a Cu(II)-ion kötőhelyének (Ac-HVH-NH<sub>2</sub> tripeptid), illetve a Zn(II)-ion kötőhelyének (Ac-HVGD-NH<sub>2</sub> tetrapeptid) modellezésére szolgált. [1]

Ezt követően munkánk során olyan multihisztidin peptideket szintetizáltunk, amelyek a hisztidint különböző pozíciókban és környezetben tartalmazzák, illetve információt szolgáltatnak a -HXH- és -HXYH- motívumok komplexképző sajátságaira. Az oldalláncok specifikus hatásainak megértéséhez következetesen változtattuk a szekvenciában a pozitív, a negatív, illetve a nagy térkitöltésű, aromás aminosav oldalláncokat, a lizint, az aszparaginsavat és a fenilalanint: Ac-HDAH-NH<sub>2</sub>, Ac-HADH-NH<sub>2</sub>, Ac-HXHZH-NH<sub>2</sub> (X, Z = Ala, Phe, Asp, Lys), Ac-HXYHZH-NH<sub>2</sub> (X, Y, Z = Ala, Phe, Asp, Gly, Val), és Ac-HXHAHXH-NH<sub>2</sub> (X = Asp, Phe). [2]

A munka folytatásaként a CuZnSOD enzim aktív centrumának modellezésére olyan 15 tagú oligopeptidet (Ac-FHVVHAGPHFNGGHVG-NH<sub>2</sub>) állítottunk elő, amelyben a fémionok megkötésében szerepet játszó hisztidin tartalmú szekvenciák, a „HVH”, „GPHF” és a „HVG” kapcsolódnak össze.

A fent említett peptidek réz(II)-, és cink(II)-komplexeinek sztöchiometriáját, stabilitását és szerkezetét pH-potenciometria, UV-látható spektrofotometria, CD spektroszkópia alkalmazásával vizsgáltuk. A réz(II)komplexek elektrokémiai paramétereit ciklikus voltammetriás mérésekkel határoztuk meg.

[1] B. Bóka, A. Myari, I. Sóvágó, N. Hadjiliadis, *Journal of Inorganic Biochemistry* **2004**, 98, 113-122.

[2] E. Székely, G. Csire, B.D. Balogh, J.Z. Erdei, J.M. Király, J. Kocsi, J. Pinkóczy, K. Várnagy, *Molecules*, **2022** (közlésre elfogadva)

# **Konferencia résztvevői**



<b>név</b>	<b>intézmény</b>	<b>e-mail</b>	<b>előadás</b>
Balogh Bettina Diána	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	balogh.bettina@science.unideb.hu	<u>E26</u>
Barczáné Buvári Ágnes		bbuvaria@gmail.com	
Béres Kende Attila	Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Kémia Intézet	beres.kende.attila@ttk.hu	<u>E19</u>
Böszörményi Éva	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	boseva@chem.u-szeged.hu	<u>E3</u> , E24
Buglyó Péter	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	buglyo@science.unideb.hu	
Bunda Szilvia	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	bunda.szilvia@science.unideb.hu	<u>E10</u> , E20
Csupász Tibor	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	csupasz.tibor@science.unideb.hu	E25, E30, <u>E31</u>
Czégéni Csilla Enikő	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	nagy.csilla@science.unideb.hu	<u>E6</u>
Dömötör Orsolya	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	domotor.o@chem.u-szeged.hu	E3, <u>E5</u>
Enyedy Éva Anna	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	enyedy@chem.u-szeged.hu	E28, E29
Farkas Etelka	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	efarkas@science.unideb.hu	
Fábián István	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ifabian@science.unideb.hu	E11
Földi-Bíró Linda	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	linda.biro@science.unideb.hu	
Gajda Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tamas.gajda@chem.u-szeged.hu	<u>E15</u>
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>E9</u> , E14

## 55. Komplexkémiai Kollokvium

név	intézmény	e-mail	előadás
Gyurcsik Béla	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	gyurcsik@chem.u-szeged.hu	E1, E2, <u>E27</u>
Gyuricza Barbara	Debreceni Egyetem, ÁOK Orvosi Képző Intézet Nukleáris Medicina Tanszék	gyuricza.barbara@med.unideb.hu	E18, <u>E23</u>
Herman Petra	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	herman.petra@science.unideb.hu	<u>E11</u>
Horváth Henrietta	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	henrietta.horvath@science.unideb.hu	E6, E7, E8, E12
Jakusch Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jakusch@chem.u-szeged.hu	
Jancsó Attila	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jancso@chem.u-szeged.hu	<u>E1</u> , E2
Joó Ferenc	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	joo.ferenc@science.unideb.hu	E6, E7, E8, E12
Jószai István	Debreceni Egyetem, Klinikai Központ Orvosi Képző Klinikai Nukleáris Medicina	joszai.istvan@med.unideb.hu	<u>E22</u>
Kalmár József	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kalmar.jozsef@science.unideb.hu	E11
Kapus István	Debreceni Egyetem	kapus.istvan@science.unideb.hu	<u>E30</u>
Kastal Zsuzsa	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kastal.zsuzsa@science.unideb.hu	
Kálmán Ferenc Krisztián	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	kalman.ferenc@science.unideb.hu	E10, E13, E14, <u>E20</u> ,
Kása Eszter	Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék	eszterorban94@gmail.com	<u>E4</u>
Kovács Hilda	Szegedi Tudományegyetem	kovacs.hilda97@gmail.com	
Kutus Bence	Szegedi Tudományegyetem Kémiai Intézet	kutusb@chem.u-szeged.hu	E3, E4, <u>E24</u>
Lakatos Gergő	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	99lakatosgergo@gmail.com	<u>E25</u>



## Konferencia résztvevői

név	intézmény	e-mail	előadás
Lihi Norbert	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	lihi.norbert@science.unideb.hu	E10, E11, E20
May Nóra Veronika	Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ	may.nora@ttk.hu	E15, E28
Mészáros János Péter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	meszaros.janos@chem.u-szeged.hu	<u>E29</u>
Nagy Noémi	Debreceni Egyetem	nagy.noemi@science.unideb.hu	<u>E17</u>
Németh Zoltán	Wigner Fizikai Kutatóközpont	nemeth.z@wigner.hu	<u>E21</u>
Orosz Krisztina	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	orosz.krisztina@science.unideb.hu	<u>E8</u>
Papp Gábor	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	papp.gabor@science.unideb.hu	E6, E7, E8, E10, <u>E12</u>
Peintler Gábor	Szegedi Tudományegyetem	peintler@chem.u-szeged.hu	E3, E24
Pivarcsik Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	pivarcsik.tamas@gmail.com	
Pósa Vivien	Szegedi Tudományegyetem	posa.vivien@chem.u-szeged.hu	<u>E28</u>
Silyéné Madarasi Enikő	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	madarasi.eniko@science.unideb.hu	<u>E13</u> , E14
Sipos Pál	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	sipos@chem.u-szeged.hu	E3, E4, E24
Sóvágó Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	sovago@science.unideb.hu	
Székely Enikő	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szekely.eniko@science.unideb.hu	<u>E32</u>
Szilágyi Fanni	Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közhasznú Nonprofit Kft.	szilagyi.fanni97@gmail.com	
Szolnoki Csenge Tamara	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	szolnokicsenge@science.unideb.hu	E7
Szűcs Dániel	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	szucsdanield94@gmail.com	<u>E18</u> , E23
Szűcs Zoltán	Atommagkutató Intézet, Debrecen	zszucs@atomki.hu	<u>E16</u>

## 55. Komplexkémiai Kollokvium

---

név	intézmény	e-mail	előadás
Tircsó Gyula	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	gyula.tircso@science.unideb.hu	E9, E10, E13, E14, E25, E30, E31
Tóth Annamária	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	toth.annamaria@chem.u-szeged.hu	<u>E2</u> ,
Tóth Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	imre.toth@science.unideb.hu	E18, E31
Udvardy Antal	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	udvardya@unideb.hu	E6, <u>E7</u> , E8
Várad Balázs	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varadi.balazs@science.unideb.hu	E9, E10, <u>E14</u> , E30
Várnagy Katalin	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varnagy.katalin@science.unideb.hu	E26, E32