



Magyar Tudományos Akadémia

KOORDINÁCIÓS KÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

Munkabizottsági ülés: Szeged, Tisza Alfa Hotel, 2024. május 28.

DISZCIPLINÁRIS ÉS INTERDISZCIPLINÁRIS KUTATÁSOK A KOORDINÁCIÓS KÉMIA FÉNYÉBEN

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

A Magyar Tudományos Akadémia, Koordinációs Kémiai Munkabizottságának 2024. évi első ülésére 2024. május 28.-án kerül sor „*Diszciplináris és interdiszciplináris kutatások a koordinációs kémia fényében*” címmel, melyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés az 57. Komplexkémiai Kollokvium ideje alatt, a szegedi Tisza Alfa Hotelben (6724, Szeged, Teréz u. 30., <http://www.alfahotelszeged.hu>) kerül megrendezésre az alábbi programponatok szerint:

- 14.00 Megnyitó és a Koordinációs Kémiai Munkabizottság újraalakulása
Enyedy Éva A. a Koordinációs Kémiai Munkabizottság elnöke (Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék)
- 14.10 *A NECTAR COST Akció bemutatása*
Enyedy Éva A. (Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék)
- 14.15 **Várnagy Katalin** (Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék)
CA18202 COST program (NECTAR) Network for Equilibria and Chemical Thermodynamics Advanced Research
- 14.30 **Dömötör Orsolya^{a,b}**, **Isabel Cavaco^c**, **Tarita Biver^d**, **Enyedy Éva A.^{a,b}** (a: Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék; b: Szegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport; c: Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Técnico, University of Lisbon, Portugal; d: Department of Chemistry and Industrial Chemistry, University of Pisa, Italy)
Mennyire megbízható a DNS kötési állandók meghatározása? Meglátások és legjobb gyakorlatok egy laboratóriumok közötti vizsgálat alapján
- 14.45 **Alsharif B. Nizar**, **Viczián Dániel**, **Bere Katalin**, **Szerlauth Adél**, **Szilágyi István** (Szegedi Tudományegyetem, Interdiszciplináris Kutatásfejlesztési és Innovációs Kiválósági Központ, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTE-SZTE Lendület Biokolloidok Kutatócsoport)
Antioxidáns nanorészecskék stabilitásának és működésének optimalizálása kolloid molekulákkal
- 15.10 **Csupász Tibor**, **Tóth Imre** (Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék)
Polioxometallátok (POM) és polioxopalladátok (POP): Néhány saját eredmény a Debreceni Egyetem Kémiai Intézetéből
- 15.30 **Kávészünet**
- 16.10 **Tuba Róbert** (HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet)
Újgenerációs olefin metatézis katalizátorok a fenntarthatóság szolgálatában
- 16.35 **Kótai László**, **Béres Kende**, **Bereczki Laura** (HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest)
Komplex vegyületek szilárd fázisú kvázi-intramolekuláris redox reakciói – egy újszerű reakcióút a szabályozott szemcseméretű átmenetifém oxid katalizátorok előállítására

- 17.00 **Vankó György, Bajnóczi Éva, Buzsáki Dániel, Keszthelyi Tamás, Mikeházi Antal, Németh Zoltán, Pápai Mátyás, Papp Mariann, Rozgonyi Tamás, Vancza Andor**
(HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest)
Fénnyel gerjesztett átmenetifém-komplexek ultragyors dinamikájának vizsgálata
- 17.25 Elnöki és titkári zárszó

Tisztelettel,

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

CA18202 COST program (NECTAR) Network for Equilibria and Chemical Thermodynamics Advanced Research

Várnagy Katalin

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: varnagy.katalin@science.unideb.hu

A kémiai egyensúlyok termodinamikai vizsgálata, a különböző rendszerekre jellemző speciáció megadása a kémia számos területén fontos, például a koordinációs kémiában, a szupramolekuláris kémiában vagy a gyógyszertervezésben.

A NECTAR egyesítette azokat a kutatókat, akik ezen a területen dolgoznak, vagy kutatásaik részét képezik a termodinamikai, egyensúlyi adatok meghatározása, felhasználása. A program vezetői fiatal kutatók, akik a tapasztalt szakemberekkel együttműködve célul tűzték e területnek a továbbfejlesztését adatbázisok létrehozásával és egységes meghatározási stratégiák kialakításával.

A program 5 munkacsoportja közül a WG2 munkacsoportban az erős és/vagy multifunkcionális ligandumokra, makromolekulákra, polielektrolitokra vonatkozó termodinamikai adatok vizsgálata volt a cél. Én ezen belül két irányban kapcsolódtam be a munkába, a peptidek vizsgálatához kapcsolódó általános tendenciák áttekintésébe, valamint egy egységes, általános leírás összeállításába a pH-potenciometriás vizsgálatokra, a titrálási eredmények kezelésére vonatkozóan. Ez utóbbi esetben a részletes leírás elkészült, egy közlemény összeállítása megtörtént, a beküldés előtti utolsó simítások vannak hátra.

A COST NECTAR program 2019. október 2-án kezdődött és 2024. április 1-ével zárult le.

Mennyire megbízható a DNS kötési állandók meghatározása? Meglátások és legjobb gyakorlatok egy laboratóriumok közötti vizsgálat alapján

Dömötör Orsolya^{a,b}, Isabel Cavaco^c, Tarita Biver^d, Enyedy Éva A.^{a,b}

^a Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Szegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Lendület Funkcionális Fémkomplexek Kutatócsoport

^c Centro de Química Estrutural, Instituto Superior Tecnico, University of Lisbon, Portugal

^d Department of Chemistry and Industrial Chemistry, University of Pisa, Italy

e-mail: domotor.o@chem.u-szeged.hu

Ez az előadás a 18202. számú *Network for Equilibria and Chemical Thermodynamics Advanced Research* COST-Akció eredményeit mutatja be, amely a borjú-tímusz DNS (ct-DNS) és egy interkalálódó fluoreszcens festék, az etídium-bromid kötődésének kvantitatív leírására fókuszált. A munkacsoport célja egy rutinszerűen alkalmazott – ám nem mindig helyesen értelmezett – *in vitro* makromolekula–kismolekula titrálásos módszer kritikai értékelése volt. Az etídium ct-DNS-kötődését spektrofluorimetriás módszerrel követte négy kutatócsoport (Lisszabon, Palermo, Pisa, Szeged), majd a mérési adatok feldolgozását, további egy csoport (Burgos) belépésével végeztük. Az együttműködés során kitűnt, hogy a kritikus pontok a következők: (i) a mérési körülmények egységessége (protokoll megléte), (ii) a primer mérési adatok kezelése, (iii) sztöchiometriai modell felállítása és (iv) a számoláshoz használt módszerek.

Az így nyert tapasztalatok kiterjeszthetők más, a bioszervetlen- és koordinációs kémiában tanulmányozott rendszerekre is.¹



Köszönetnyilvánítás: NKFIH: TKP-2021-EGA-32

1 O. Dömötör et al., How reliable is the evaluation of DNA binding constants? Insights and best practices based on an inter-laboratory fluorescence titration study, *Spectrochim. Acta. A Mol. Biomol. Spectrosc.*, (benyújtott kézirat)

Antioxidáns nanorészecskék stabilitásának és működésének optimalizálása kolloid molekulákkal

Alsharif B. Nizar, Viczián Dániel, Bere Katalin, Szerlauth Adél, Szilágyi István

Szegedi Tudományegyetem, Interdiszciplináris Kutatásfejlesztési és Innovációs Kiválósági
Központ, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTE-SZTE Lendület Biokolloidok
Kutatócsoport
e-mail: szistvan@chem.u-szeged.hu

A nanozyme-ok enzimek működésének utánzására képes nanoszerkezetek, amelyek képesek leküzdeni a természetes enzimek korlátait (érzékenység kísérleti körülményekre, enzim inhibitorok, költség, stb.) különféle alkalmazásokban. Ezen anyagok az elmúlt évtizedben a natív biokatalizátorok ígéretes alternatíváivá váltak, viszont számos kérdés (pl. katalitikus mechanizmus megértése, a részecskék közötti kölcsönhatások és aktivitásuk optimalizálása) még széleskörű kutatásokat igényel. Az előadásra kerülő munka során kolloidkémiai módszereket alkalmaztunk fémalapú szervesetlen nanozyme-ok stabilitásának és antioxidáns hatásának optimalizálására. Cérium-oxid, mangán-oxid, poroszkék és réteges kettős hidroxid nanoszerkezeteket együttes lecsapással és hidrotermális módszerekkel állítottunk elő, képződésüket XRD, XPS és TEM módszerekkel igazoltuk.¹⁻³ Elektroforetikus és dinamikus fényszóráson alapuló vizsgálatok eredményei rámutattak, hogy a részecskék mérsékelt kolloid stabilitást mutatnak, amit a PDADMAC polielektrolittal való felületi funkcionálizálással és latex részecskékre történő immobilizálással növeltünk meg. Az utóbbi módszerrel előállított kolloid molekulák stabilis diszperziót alkottak, illetve jelentős antioxidáns hatással rendelkeztek, amelyet enzimaktivitás tesztekkel és sejten belül indukált oxidatív stressz csökkentésének képességével jellemeztünk. A kapott hibrid szerkezetek magas hőmérsékleten is működőképeseek, ahol a természetes enzimek gyorsan elveszítik aktivitásukat.¹ Továbbá kolloid molekulákat alkottunk nanozyme-ok irányított heteroaggregációjával, amely során széles spektrumú antioxidánsok keletkeztek, amelyek egyidejűleg képesek különféle reaktív oxigén származékok lebontására.² Az eredmények újszerű betekintést adnak az enzimutánzó antioxidáns anyagok tervezésébe egyszerű és olcsó előállítási módokon keresztül, amelyek alkalmazásra kerülhetnek orvosi biológiai kezelésekben (pl. antioxidáns terápia) és/vagy ipari gyártási (pl. műanyagipar) folyamatokban.

Köszönetnyilvánítás: NKFIH 142258, Horizon Europe MSCA SE 101086226, MTA Lendület LP2022-16/2022.

¹Alsharif N.B., Bere K., Sáringi S., Samu G.F., Takács D., Hornok V., Szilágyi I., *J. Mater. Chem. B*, **2021**, *9*, 4929-4940.

²Alsharif N.B., Viczián D., Szczer A., Szilágyi I., *J. Phys. Chem. C*, **2023**, *127*, 17201-17212.

³Szerlauth A., Madácsy T., Samu G.F., Bíró P., Erdélyi M., Varga G., Xu Z.P., Maléth J., Szilágyi I., *Chem. Commun.*, **2024**, *60*, 1325-1328.

Polioxometallátok (POM) és polioxopalladátok (POP): Néhány saját eredmény a Debreceni Egyetem Kémiai Intézetéből

Csupász Tibor, Tóth Imre

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

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

A diagnosztikában alkalmazható fémionok komplexálására nemcsak a klasszikus értelemben vett szerves poliamino-polikarboxilát, -poliamidát stb. típusú ligandumok alkalmasak. A fémorganikus vázszerkezetek, illetve a szupramolekuláris koordinációs komplexek képződése önszerveződő módon történik, így a teragnosztikában alkalmazható radioizotópok (pl. α -terápia: ^{225}Ac , ^{213}Bi ; PET: ^{68}Ga , ^{44}Sc ; SPECT: ^{111}In , ^{201}Tl) ilyen komplexképzők felhasználásával is „becsomagolhatók”. A komplexképződéssel javítható a sugárterápia hatékonysága az izotópok külső hatások elleni védelmével, illetve a diagnosztikai képalkotás is biztonságosabbá válhat. A polioxopalladát (POP) vegyületcsalád is ezekhez a típusú vegyületekhez tartozik, történetük szűk két évtizedre tekint vissza.¹ Több előnyös tulajdonságuk (pl. méretezhető koordinációs üreg, a komplexálni kívánt fémion stabilizálható adott oxidációs állapotban, funkcionalizálhatóság, stb.) vezetett ahhoz, hogy akár az orvosi gyakorlatban (képalkotás, sugárterápia, antitumor/antibakteriális/antiparazita hatás) is alkalmazható ágenseket állítsanak elő.

Ulrich Kortz és kutatócsoportja (Constructor University, Bréma, Németország) fedezte fel 2008-ban a POP alapvegyületét, a $[\text{Pd}_{13}\text{As}_8\text{O}_{34}(\text{OH})_6]^{8-}$ -t.² Azóta foglalkoznak POP típusú komplexképzők előállításával, melyek központi üregébe különböző (az s, p, d és f mezőbe tartozó) fémionok koordinálhatók. Mára elég tapasztalat gyűlt össze ahhoz, hogy értelmezhető legyen a POP-ok szerkezeti kémiájának sokszínűsége, a nanoköbös $[\text{MPd}_{12}\text{O}_{32}\text{L}_8]^{n-}$ és a nanocsillag $[\text{MPd}_{15}\text{O}_{40}\text{L}_{10}]^{n-}$ (M = addenda fémion, L = fedőcsoport) szerkezetek, esetenként a dimerek kialakulása. A brémaiakkal együttműködve a debreceni Ritka(föld)fém Kutatócsoportban főként az új vegyületek oldatbéli szerkezetét, a monomer és/vagy dimer jelenlétét vizsgáltuk NMR mérésekkel olyan nem szokványos magokon, mint a ^{69}Ga , ^{115}In , $^{203/205}\text{Tl}$ és ^{209}Bi . Ennek a gyümölcsöző kapcsolatnak az eredményeit fogom előadásom során bemutatni.³⁻⁵

Köszönetnyilvánítás: Megvalósult, a Debreceni Egyetem Publikációs Tudománytámogatási Programjának támogatásával és kutatásainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-128201 pályázata támogatta.

¹Yang, P.; Kortz, *Acc. Chem. Res.* **2018**, *51* (7), 1599–1608.

²Izarova, N. V.; et. al.; *Inorg. Chem.* **2009**, *48* (16), 7504–7506.

³Ma, T.; et. al.; *Inorg. Chem.* **2019**, *58* (23), 15864–15871.

⁴Manna, P.; et. al.; *Inorg. Chem.* **2020**, *59* (23), 16769–16782.

⁵Ma, T.; et. al.; *Inorg. Chem.* **2023**, *62* (33), 13195–13204.

Újgenerációs olefin metatézis katalizátorok a fenntarthatóság szolgálatában

Tuba Róbert

HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

e-mail: tuba.robert@ttk.hu

A katalízis alkalmazása kulcsfontosságú napjaink környezetbarát kémiai technológiáiban. Becslések szerint a kereskedelmi forgalomban levő vegyi anyagok 90%-át részben vagy egészben valamilyen katalitikus reakcióval állítják elő, amely a fenntartható katalitikus folyamatok széles körű alkalmazását igénylik, további kihívások elé állítva ezzel a tudományt. A zöld kémiai eljárások területén a hatékony és gazdaságos katalizátorok fejlesztése folyamatos kihívást jelent. A fémorganikus vegyületek kutatása alaptudományos és ipari szempontból is világszerte nagy jelentőségű. Az olefinmetatézis az elmúlt ötven évben felfedezett új fémorganikus katalizátorokkal kiváltott reakciók egyike, amely új ipari technológiai lehetőségeket nyitott az innovatív anyagok, petrolkémia és gyógyszeripari termékek előállításában. A „metatézis” szó görög eredetű, jelentése helyzetváltozás vagy átrendeződés. Általánosan megfogalmazva az olefinmetatézis-reakciók során katalizátor jelenlétében két olefinmolekula két, új, kettős kötést tartalmazó molekulává rendeződnek át. Ezeknek a szintetikus eljárásoknak az atomhatékonysága gyakran 100%, amely azt mutatja, hogy az összes kiindulási anyag beépül a termékekbe melléktermékek képződése nélkül.

A műanyag hulladék-kezeléssel kapcsolatos növekvő aggodalmak sokféle stratégiát és technológiát igényelnek a fenntartható és körkörös gazdaság felé történő elmozduláshoz. Az egyik ilyen stratégia a perzisztens és fosszilis alapú műanyag hulladékok – mint például a polietilén – kihívásainak kezelése új katalitikus eljárások fejlesztésével. A többdimenziós körkörös gazdaság koncepciója alapján ezzel a megközelítéssel például a környezetszennyező műanyag hulladékok kémiai újrahasznosítható és biológiailag lebomló polimerekké alakíthatók.¹

Az olefin-metatézis speciális esete az izomerizációs metatézis (ISOMET). Az ISOMET során az olefines kötések a szénhidrogén lánc mentén vándorolnak (izomerizáció), amelyet metatézis reakció követ. Az előadás során olyan újgenerációs ciklikus és biciklikus alkilamino karbén ruténium (CAAC-, BICAAC-Ru)^{2,3} olefin metatézis katalizátorok kerülnek bemutatásra, amelyek alternatívát kínálnak egy fenntarthatóbb műanyaggyártásra.

¹Farkas, V.; Nagyházi, M.; Anastas, P. T.; Klankermayer, J.; Tuba, R. *ChemSusChem* **2023**, *16*, e202300553.

²Farkas, V.; Csókás, D.; Erdélyi, Á.; Turczel, G.; Bényei, A.; Nagy, T.; Kéki, S.; Pápai, I.; Tuba, R. *Adv. Sci.* **2024**, 2400118.

³Nagházi, M.; Lukács, Á.; Turczel, G.; Hancsók, J.; Valyon, J.; Bényei, A.; Kéki, S.; Tuba, R. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202204413.

Komplex vegyületek szilárd fázisú kvázi-intramolekuláris redox reakciói – egy újszerű reakcióút a szabályozott szemcseméretű átmenetifém oxid katalizátorok előállítására

Kótai László, Béres Kende, Bereczki Laura

HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

e-mail: kotai.laszlo@ttk.hu

Az átmenetifémek (Ag, Cu, Zn, Cd, Co, Ni, Fe, Cr), redukáló ammónia, piridin, karbamid ligandumokkal és oxigéntartalmú anionokkal (permanganát, kromát, dikromát, perrenát, perklorát, nitrát, szulfát, szelenát, perszulfát) alkotott komplexeinek előállítása kihívásokkal teli feladat a redukálni képes ligandum és az oxidáló anion oldatfázisú kölcsönhatása miatt. Ezek az anyagok alacsony hőmérsékleten (<150 °C) olyan szilárd fázisú kvázi-intramolekuláris (ligandum-anion) redox reakciókat mutatnak, amelyek amorf, defekt szerkezetű nano méretű oxidokat és vegyes fém oxidokat eredményeznek. Az izomorf szilárd oldatok képzése (pl. [(Fe,Cr)(Urea)₆]₃, [Ag(NH₃)₂(ClO₄,MnO₄)] vagy vegyes fémtartalmú anionokkal alkotott komplexek [(Me(urea)₆](CrO₄)(MnO₄), Me=Fe(III), Al, Cr) új lehetőségeket nyitnak pl. az *in-situ* hordozóra felvitt (Al-vegyes komplexeknél Al₂O₃) vagy dopolt oxidok előállítására. Ammónia ligandumot tartalmazó komplexek esetében a permanganát-sókból nanoméretű MMn₂O₄ (M=Cu, Zn, Co, Cd, Ni) típusú spinellek képződnek, de a fémionok vegyértékének változtatásával, illetve külső és belső szférás ligandumokkal, változó fém:mangán arányú spinell oxidok állíthatóak elő. A [Co(NH₃)₆](MnO₄)₃ (Co:Mn=1:3), [Co(NH₃)₅Cl](MnO₄)₂ (Co:Mn=1:2), [Co(NH₃)₆]Cl₂(MnO₄) és [Co(NH₃)₄CO₃]MnO₄ (Co:Mn=1:1) alkalmazásával Co:Mn=1:1-3 arányú nanospinellek (2-100 nm) állíthatóak elő. Ezek szerkezete (normál, inverz, a kation és vegyérték megoszlás a T-4 és OC-6 helyeken és a defektek száma) szabályozható a komplexek összetételével, és az elbontás körülményeivel. A bomlási reakciók többnyire ammónium-nitrát intermedier képződésével játszódnak le, amely az ammónia ligandum szelektív oxidációjának terméke. Az NH₄NO₃ megolvad, és ebben az olvadékban játszódnak le reakciók. Izoterm oldószeres hőelvonással (reflux) végzett bontási folyamatot dolgoztunk ki, amellyel ezeket az anyagokat veszélytelenül lehet oxidokká alakítani. Az alkálifém-dopolt anyagok előállításához szintetizáltunk egy különleges anyagot, a [Co(NH₃)₆][KCl₂(MnO₄)₂] vegyületet, amely háromfogú koordinált permanganát-iont tartalmaz, és a komplex anion központi atomja kálium, klorid és permanganát koordinációs szférával és 2-D permanganát linkelt polimer szerkezettel rendelkezik. A komplexek szerkezeti, spektroszkópiás (IR, Raman, UV, Mössbauer, ESR) és termikus analízis (TG-MS, DSC) vizsgálatain túl, a keletkező oxidtermékek tulajdonságainak vizsgálatai (BET, XPS, SEM, HR-TEM) mellett a katalitikus tulajdonságokat is vizsgáltuk, CO oxidációs és CO₂ redukációs és hidrogénezés reakciókban.

Fénnyel gerjesztett átmenetifém-komplexek ultragyors dinamikájának vizsgálata

Vankó György, Bajnóczi Éva, Buzsáki Dániel, Keszthelyi Tamás, Mikeházi Antal, Németh Zoltán, Pápai Máttyás, Papp Mariann, Rozgonyi Tamás, Vancza Andor

HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest

e-mail: vanko.gyorgy@wigner.hu

Molekuláris rendszerek fénnel kiváltott átalakulásai fontos szerepet játszanak a fizika, a molekuláris biológia, a kémia és az anyagtudomány különböző ágaiban. A fotoszintézis vagy a látás mechanizmusa jó példa a sokat vizsgált problémákra, de fontos megemlíteni a fénnel aktiválható molekuláris eszközök és a fényhasznosító rendszerek létrehozására tett erőfeszítéseket is. Az ezekben lezajló jelenségek megértéséhez nélkülözhetetlen a fénnel kiváltott molekuláris átalakulások elemi fizikai lépéseinek megértése. E folyamatok természetes időskálája femtoszekundumos, megfigyelésükhöz tehát olyan eszközökre van szükségünk, amelyek ilyen időfelbontással tudják vizsgálni az elektronok és a magok dinamikáját. Az ezirányú kutatásokban leggyakrabban alkalmazott kétimpulzusos (ún. pumpa-szonda) kísérletekben ultrarövid lézer-impulzusokkal gerjesztjük a tanulmányozott rendszert, majd az átalakulásokat választott időkülönbséggel érkező szondaimpulzusokkal vizsgáljuk. A szabadelektron-röntgenlézerek (XFEL-ek) femtoszekundumos impulzusait szondaként alkalmazva kihasználhatjuk a röntgen-technikák előnyeit, így röntgenspektroszkópiával feltérképezhetjük a töltés, a spin, ill. az atomi szerkezet változásait az átalakulások elemi lépéseiben, röntgenszórással pedig meghatározhatjuk az idő függvényében a rövid távú mellett a hosszabb távú szerkezet változását, valamint a molekula relaxációja során a környezetnek átadott energiát is. Az időbeli felbontás javulása lehetővé tette a részfolyamatok kísérleti elkülönítését, a magmozgás koherens dinamikájának megfigyelését; a kvantumkémiai és kvantumdinamikai modellezés segítségével pedig az átalakulások finom részleteit is megérthetjük. Az előadásban ezekre mutatunk néhány, átmenetifém-komplex vizsgálatából származó példát.