



Magyar Tudományos Akadémia

KOORDINÁCIÓS KÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

Munkabizottsági ülés: Szeged, Tisza Alfa Hotel, 2023. május 31.

A SPEKTROSKÓPIAI MÓDSZEREK SOKSZÍNŰSÉGE A KOORDINÁCIÓS KÉMIAI KUTATÁSOKBAN

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

A Magyar Tudományos Akadémia, Koordinációs Kémiai Munkabizottságának 2023. évi első ülésére 2023. május 31.-én kerül sor „A spektroszkópiai módszerek sokszínűsége a koordinációs kémiai kutatásokban” címmel, melyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés az 56. 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
Enyedy Éva A. a Koordinációs Kémiai Munkabizottság elnöke (Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen, Szerves és Analitikai Kémiai Tanszék)
- 14.10 **Tóth Imre** (Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék)
NMR itthon és a stockholmi Királyi Műszaki Egyetemen
- 14.35 **Bodor Andrea** (Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Analitikai és Bio-NMR Laboratórium)
Mit tanul egy PhD hallgató? Avagy: „Így témavezettek Ti“
- 15.05 **Novák Levente, Nyul Dávid, Miklósi Tamás, Bányai István** (Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék)
Polielektrolit komplexképzők előállítás és néhány érdekes tulajdonsága
- 15.25 **Nyul Dávid, Novák Levente, Bányai István** (Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék)
Többkvantum relaxációs módszerek alkalmazása kolloid rendszereken
- 15.45 **Bányai István** (Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék)
NMR a koordinációs kémiában: ami a spektrumokban benne marad
- 16.15 **Kávészünet**
- 16.55 **Samu Gergely Ferenc^{a,b}, Sárosi Krisztina^b, Mogyorósi Károly^b, Chikán Viktor^{b,c}, Janáky Csaba^{a,b}** (a: Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék; b: ELI ALPS Lézeres Kutatóintézet, Tudományos Alkalmazások Osztálya; c: ASML, San Diego)
Ultragyors folyamatok feltérképezése tranzien্স abszorpciós spektroszkópiával
- 17.15 **May Nóra V.^a, Stayer Martina^a, May Zoltán^b** (a: ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ; b: ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Anyag és Környezetkémiai Intézet)
Réz(II)komplexek geometriája az elektronspin rezonancia spektroszkópia és az egykristály röntgendiffrakciós szerkezetvizsgáló módszerek tükrében
- 17.45 **Farkas Etelka** (Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék)
Fém tartalmú gyógyszerek fejlesztésére irányuló kutatási eredményeket tárgyaló "Metal Ions in Biological Systems Vol 24: Targeted Metallo-Drugs: Design, Development, and Modes of Action" könyv bemutatója
- 17.55 Elnöki és titkári zárszó

Tisztelettel,

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

NMR itthon és a stockholmi Királyi Műszaki Egyetemen

Tóth Imre

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

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

Bár mindketten a Brücher-iskolában kezdtük kutatói pályánkat, közvetlen szakmai kapcsolatba 1990-től kerültünk, akkoriban a stockholmi Kungliga Tekniska Universitet Szervetlen Kémiai Tanszékén gyakran voltunk együtt (is) vendégkutatók. Az ottani kutatási szabadság, az NMR-laboratórium, különösen a ^{205}Tl mérések lehetősége kínálta a közös munka lehetőségét. Mindketten az NMR “bűvkörébe” kerültünk, majd közösen szorgalmaztuk a debreceni NMR labor bővítését, ami 1996-tól két, máig működő “ócskavas áron” beszerzett, majd többszörösen felújított készülék beállítását, egyúttal egy nyitott, mindenki számára hozzáférhető NMR-mérőhely létrejöttét eredményezte. Bányai István kutatóként, oktatóként, üzemeltető mindeneként ennek a laboratóriumnak lett az oszlopa. A visszatekintés eltekint a nehézségektől, inkább a kutatás örömteli momentumait keresi.

[1] W. W. Ayass, T. Fodor, E. Farkas, Z. Lin, H. M. Qasim, S. Bhattacharya, A. S. Mougharbel, K. Abdallah, M. S. Ullrich, S. Zaib, J. Iqbal, S. Harangi, G. Szalontai, I. Bányai, L. Zékány, I. Tóth, U. Kortz, *Inorg. Chem.* **2018**, *57*(12), 7168.

[2] Szilágyi L., E. Kövér K., Batta Gy., Bányai I., Tóth I. *Magyar Kémiai Folyóirat – Kémiai Közlemények*, **1997**, *117*(2-3) 133.

[3] A. Bodor, I. Bányai, L. Zékány, I. Tóth, *Coord. Chem. Rev.* **2002**, *228*(2), 163.

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

[5] I. Bányai, J. Glaser, K. Micskei, I. Tóth, L. Zékány, *Inorg. Chem.* **1995**, *34*(14), 3785.

Köszönetnyilvánítás: Köszönettel tartozom a NKFIH K-128201 pályázat keretében kapott támogatásért.

Mit tanul egy PhD hallgató? Avagy: „Így témavezettek Ti“

Bodor Andrea

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Analitikai és Bio-NMR Laboratórium.

e-mail: andrea.bodor@ttk.elte.hu

Az előadásban elsősorban arra szeretnék reflektálni, hogy doktorandusz hallgatóként mit tanultam Bányai Istvántól? Doktori témám az Al(III)-komplexek vizsgálata volt, és Bányai Istvánnal az NMR spektroszkópiai mérések kapcsán kezdtem el együtt dolgozni. Lelkesedése, érdeklődése kiváló pedagógiai érzéke hozzájárult, hogy érdeklődésem fókuszába az NMR spektroszkópia került. Nagymértékben előmozdította azon biztos alapok megteremtését, amit a mérések tervezése, beállítása, kiértékelése és a kémiai információ kinyerése jelent. A debreceni 360 MHz-es készüléken történő vizsgálatok kapcsán azon kevesek közé tartozom, aki a szokványos ^1H -mérések helyett előbb mért, értékelt és optimált ^{13}C és ^{19}F spektrumokat – köszönhetően az oxalát és fluorid ligandumoknak. Debrecenen kívül dolgoztunk együtt Stockholmban a KTH 500 MHz-es készülékén, ahol tallium és platina vegyületek kutatásába kapcsolódtam be, és ahol a relaxációt érintő értékes tanácsaira építhettem.

A két sikeres PhD fokozat megszerzését követően kutatói pályámon önállóan kezdtem el az NMR spektroszkópiai vizsgálatok művelésébe. Mit jelentettek ebben az időszakban a doktoranduszi évek?

Az előadás során példákkal szeretném ezeket a mozzanatokot illusztrálni.

Többkvantum relaxációs módszerek alkalmazása kolloid rendszereken

Nyul Dávid, Novák Levente, Bányai István

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, Környezeti Kolloidok Kutatócsoport

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

Az NMR, mint szerkezetvizsgáló módszer már többször bizonyította képességeit. Oldatok vizsgálatakor legtöbbször az ^1H és ^{13}C technikákkal találkozhatunk, amik gyorsan és egyszerűen kivitelezhetők. Kis molekulák esetében a kiértékelés általában egyszerű és jól reprodukálható eredményeket szolgáltat.

Makromolekulák és kolloid rendszerek esetében azonban a hagyományos technikák nem mindig használhatók, mert a részecske lassú mozgása miatt a relaxáció felgyorsul, és a jelek kiszélesednek, összemosódnak vagy a részecske egyáltalán nem is tartalmaz mérhető protont. Ilyen helyzetekben értékes információval szolgálhat egyéb X magok vizsgálata. Szerencsére szinte valamennyi elemnek van NMR aktív stabil izotópja, így az eszköztár elég nagy. Az egyik legkönnyebben mérhető X mag a ^{23}Na , ami az egyetlen stabil NMR aktív nátrium izotóp és $3/2$ spinnel rendelkezik. Kizárólagos előfordulása mellett igen jó az érzékenysége és a giromágneses hányadosa is közel esik a ^{13}C -éhez. Közvetlen információt a vizsgált anyagról azonban ritkán nyerhetünk ^{23}Na technikákkal, ezért célszerűbb a részecske-nátriumion kölcsönhatást vizsgálni hasonlóan az ^1H relaxometriához.

A $3/2$ magspinből adódóan a ^{23}Na kvadrupólus mag, ami azt jelenti, hogy megfelelő körülmények közt megfelelő impulzusprogrammal képesek vagyunk többkvantum relaxációs útvonalakat detektálni. Ahhoz, hogy oldatfázisban is kialakulhassanak magasabb rangú koherenciák, arra van szükség, hogy a nátrium mozgása korlátozott legyen, pontosabban a rotációs-korrelációs ideje elég nagy legyen ahhoz, hogy a kvadrupólus effektus ne átlagolódjon ki. Ez gyakorlatban azt jelenti, hogy a nátriumnak egy makromolekulához kell kötődnie valamilyen módon. Többkvantum relaxációs útvonalak megjelenéséhez már egy pillanatszerű kötődés is elégséges, ami miatt sok kolloid rendszerben jól mérhető a jelenség.

Köszönetnyilvánítás: A kutatást az NKFI Hivatal (K-131989) támogatta.

NMR a koordinációs kémiában: ami a spektrumokban benne marad

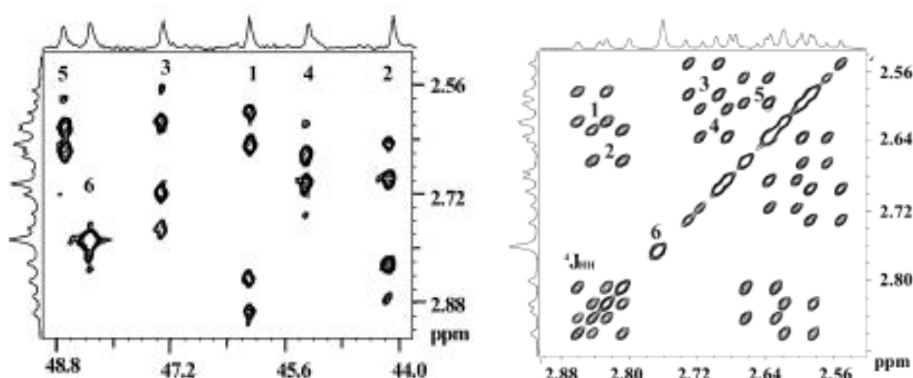
Bányai István

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

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

A mágneses magrezonancia mára már a koordinációs kémia egyik alapvető mérőmódszere. Ellentétben azonban a módszerben bekövetkezett nagy fejlődéssel, azt tapasztalhatjuk, hogy nem használjuk ki az NMR spektrumokban benne lévő összes információt, általában megelégszünk az egyszerű kémiai eltolódás spektrumokkal.

Az előadásban az NMR spektrumok dinamikai és szerkezeti elemzésében rejlő információkról mutatok be néhány jellegzetes példát. Megmutatom a rutinszerűen rendelkezésre álló multinukleáris és kétdimenziós módszerek alkalmazását koordinációs kémiai jelenségek feltárásában.



Az $\text{Al}_3\text{citrat}_3\text{OH}_4^-$ komplex kétdimenziós ^1H - ^{13}C és ^1H - ^1H NMR spektrumai [1]

Az előadásban az elmúlt 35 év NMR tanulmányainak legérdekesebb momentumait mutatom be, ismertetve a technikák alapelemeit.

[1] A. Bodor, I. Bányai, I. Tóth, *Coord. Chem. Rev.* **2002**, 228, 175.

Köszönetnyilvánítás: Az előadás megtartásához szükséges kutatómunkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-131989 pályázata támogatta.

Ultragyors folyamatok feltérképezése tranziens abszorpciós spektroszkópiával

Samu Gergely Feren.^{a,b}, Sárosi Krisztina^b, Mogyorósi Károly^b, Chikán Viktor^{b,c}, Janáky Csaba^{a,b}

^a Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

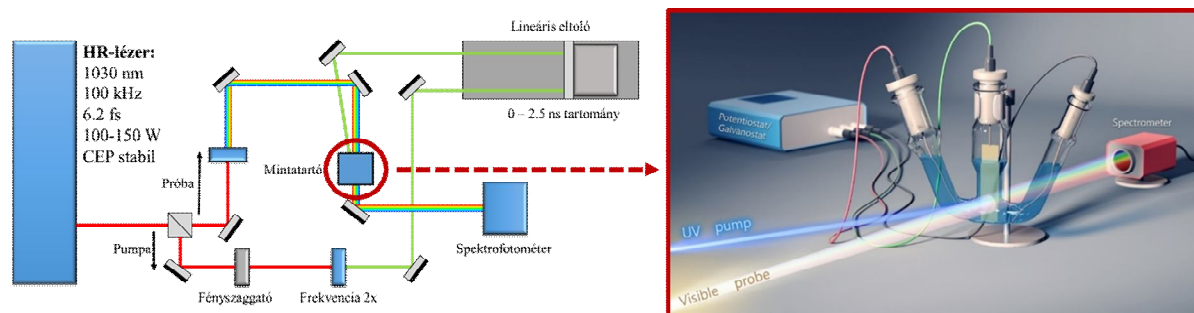
^b ELI ALPS Lézeres Kutatóintézet, Tudományos Alkalmazások Osztálya

^c ASML, San Diego

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

A fotoaktív kémiai vagy biológiai rendszerekben a fényelnyelés során bekövetkező fotokémiai és fotofizikai folyamatok kinetikája jellemzően az ultrarövid (fs-ns) időskálára tehető. Ezek jellemzően töltésátlépéssel vagy átrendeződéssel járó lépések, melyek megfigyelését pumpa-próba technikákkal valósíthatjuk meg. Ilyen módszerekkel követhetővé válik az elektronátadás fotoszintézis során vagy a félvezetőkben bekövetkező töltésszeparáció/annihiláció egyes részlépései. UV-látható tranziens abszorpciós mérések során egy fényelnyelő anyagot (félvezető vagy fémkomplex) egy rövid lézerimpulzussal (pumpa) gerjesztünk miközben egy időben később érkező látható tartományba eső fényimpulzussal (próba) vizsgáljuk. A két fényimpulzus között eltelt idő változtatásával a létrehozott gerjesztett állapot alapállapotba történő relaxációjának kinetikáját vizsgálhatjuk. Kutatásaink során jellemzően szilárd félvezető anyagok (pl.: MoS₂, CuI, fém-halogenid perovszkitok) töltéshordozó dinamikájának mélyebb megértését tűztük ki célul.

Előadásom során bemutatom az ELI ALPS Lézeres Kutatóintézetben fejlesztett tranziens abszorpciós/reflexiós spektroszkópiái mérésekhez használt műszert (**1. ábra**) és a mérés technika alapjait. Reprezentatív példákon keresztül ismertetem milyen információ nyerhető félvezető anyagokról illetve fémkomplexekről ezzel a mérés technikával.



1. ábra A tranziens abszorpciós/reflexiós spektroszkópiához használt elrendezés sematikus ábrája.

Köszönetnyilvánítás: Az ELI ALPS projekt (GINOP-2.3.6-15-2015-00001) az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósul meg. A előadásban bemutatott kutatás továbbá az NKFIH által a FK-138888 projekt keretében és a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült.

Réz(II)komplexek geometriája az elektronspin rezonancia spektroszkópia és az egykristály röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálati módszerek tükrében

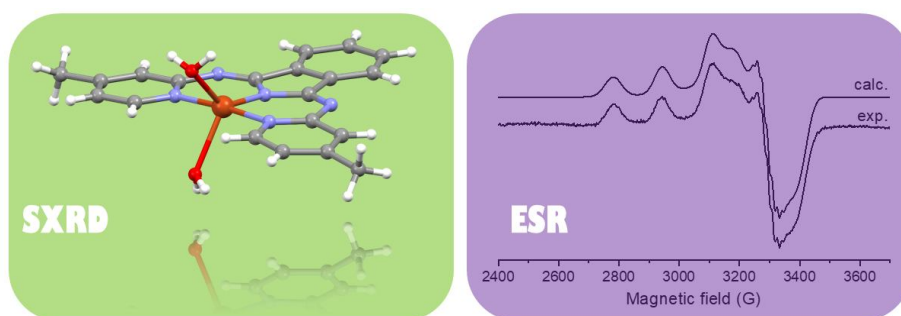
May Nóra V.^a, Stayer Martina^a, May Zoltán^b

^a ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ

^b ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Anyag és Környezetkémiai Intézet

e-mail: may.nora@ttk.hu

Réz(II)komplexek szerkezetvizsgálatára szilárd fázisban az egykristály röntgendiffrakciós (SXRD) technika a leghatékonyabb módszer. A kristályszerkezet nagyon pontos képet ad a komplexek geometriájáról, a ligandumok koordinációjáról és konformációjáról, nagy pontossággal meghatározhatók a komplexben kialakuló kötéshosszak és kötésszögek. Nehézséget jelent azonban, hogy mérésre alkalmas egykristályok előállítása sokszor nem lehetséges, másrészt a szilárd fázisú szerkezet eltérhet az oldatban megfigyelhető szerkezettől, ami különösen biológiailag releváns minták esetén lehet fontos. A réz(II)komplexek oldatbeli szerkezete jól vizsgálható az elektronspin rezonancia spektroszkópia (ESR) segítségével, amely azonban nem ad olyan részletes információt a szerkezetről. A két módszer egyidejű alkalmazása a réz(II)komplexek szerkezetvizsgálatában lehetőséget nyújt a szilárd és oldat fázisú szerkezetek összehasonlítására. Célunk azonosítani azokat a különbségeket, amelyekkel gyakran számolni kell a komplexek feloldásakor, másrészt az ESR és SXRD adatok összehasonlításával olyan összefüggéseket keresünk, amelyek segítenek az ESR spektrumokból pontosabb szerkezeti adatokat megadni akkor, amikor egykristály nem áll rendelkezésre. Ehhez egy olyan adatbázist tervezünk felállítani, amibe összegyűjtjük a különböző réz(II)komplexek ESR spektroszkópiái és SXRD adatait (**1. ábra**), amely így elemezhető statisztikai módszerekkel. Az előadásban ennek a vizsgálatnak az első eredményeit mutatom be.



1. ábra A [Cu(4Mepy-ind)(H₂O)₂] komplex kristályszerkezete (bal) valamint vizes oldatának számolt és mért anizotróp ESR spektruma (jobb)

Fém tartalmú gyógyszerek fejlesztésére irányuló kutatási eredményeket tárgyaló *"Metal Ions in Biological Systems Vol 24: Targeted Metallo-Drugs: Design, Development, and Modes of Action"* könyv bemutatója

Farkas Etelka

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: farkaset@unideb.hu

