



Magyar Tudományos Akadémia

## KOORDINÁCIÓS KÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

Munkabizottsági ülés: Balatonszárszói, SDG Konferencia Központ, 2026. május 27-28.

### FÉMIONOK SZEREPE BIOLÓGIAI ÉS FUNKCIONÁLIS RENDSZEREKBE

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

A Magyar Tudományos Akadémia, Koordinációs Kémiai Munkabizottságának idei első ülésére 2026. május 27-28.-án kerül sor, melyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés az 59. Komplexkémiai Kollokvium ideje alatt, a balatonszárszói SDG Konferencia Központban (8624 Balatonszárszó, Csárda utca 41.) kerül megrendezésre az alábbi programpontok szerint:

#### 2026. május 27.

14.00 Megnyitó

**Gyurcsik Béla** a MKE Komplexkémiai Szakcsoportjának elnöke

**Enyedy Éva A.** Koordinációs Kémiai Munkabizottság elnöke

14.10 **Lente Gábor** (Pécsi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)  
*Kinetikai játékok egyenesekkel: hogyan lesz egy tudományos cikkből diákolimpiai feladat?*

14.30 **Lih Norbert**<sup>1,2</sup> (1: Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék; 2: HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmus Kutatócsoport)  
*Metalloenzim alapú antioxidáns komplexek*

#### 2026. május 28.

14.00 **Várnagy Katalin** (Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék)  
*Peptidek fémkomplexei: tioamidoktól a tau fragmensekig*

14.20 **Kállay Csilla** (Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék)  
*Fémionok kölcsönhatása peptidekkel: komplexképződés és fémionkatalizált oxidáció*

14.40 **Tóth Annamária**<sup>1</sup>, **Lars Hemmingsen**<sup>2</sup>, **Kele Zoltán**<sup>3</sup>, **Kaare Teilmann**<sup>4</sup>, **Andreas Prestel**<sup>4</sup>, **Peter Waaben Thulstrup**<sup>2</sup>, **Jancsó Attila**<sup>1</sup> (1: Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék; 2: Department of Chemistry, University of Copenhagen; 3: Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytani Intézet; 4: Department of Biology, Linderstrøm-Lang Centre for Protein Science, University of Copenhagen)  
*A ciszteinek pozíciójának hatása az As<sup>III</sup> megkötődésére fehérjék multitiol típusú kötőhelyein: szisztematikus peptid modell vizsgálatok*

15.00 **Kávészünet**

15.30 **Török Péter, Hajdú Erik, Kutus Bence** (Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék)  
*Lítium-hidroxid előállítását célzó új szintetikus módszerek kidolgozása*

15.50 **Tircsó Gyula** (Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék)  
*Átmenetifém-komplexek mint a Gd(III)-alapú MRI kontrasztanyagok biztonságosabb alternatívái: tervezés, előállítás és kémiai jellemzés*

- 16.15 **Kapus István<sup>1,2</sup>, Váradi Balázs<sup>2</sup>, Csupász Tibor<sup>2</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>2</sup>, Bunda Szilvia<sup>2</sup>, Garda Zoltán<sup>2</sup>, Lihi Norbert<sup>3</sup>, May Nóra V.<sup>4</sup>, Tircsó Gyula<sup>2</sup>** (1: Debreceni Egyetem, Kémiai Tudományok Doktori Iskola; 2: Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék; 3: Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Tanszék; 4: HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont)

*8-hidroxikinolin fémkötő oldalláncot tartalmazó makrociklusos ligandumok előállítása és vizsgálata diagnosztikai alkalmazásokhoz*

16.40 Elnöki és titkári zárszó

Tisztelettel,

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

# Kinetikai játék egyenesekkel: hogyan lesz egy tudományos cikkből diákolimpiai feladat?

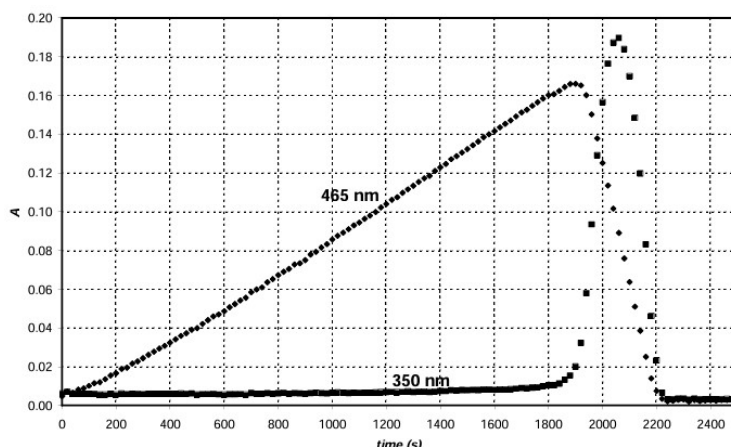
*Lente Gábor*

Pécsi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

e-mail: lenteg@gamma.ttk.pte.hu

Bő húsz éve Fábián István kutatócsoportjában az egyik fontos kutatási téma a kén különböző oxidációs állapotainak redoxireakcióira koncentrált. Ennek részeként végeztük el a ditionácion ( $S_2O_6^{2-}$ ) vizes közegbeli reakcióinak részletes kinetikai vizsgálatát számos szerves oxidálószerrel. Ezen folyamatok érdekes sajátossága, hogy az oxidálószerre nézve nulladrendűek, így egy kis fantáziával érdekes kinetikai játékot tettek lehetővé: a szakértők számára is rendkívül váratlan alakú, egyenesekből és parabolákból álló kinetikai görbék detektálását és egy idő után tervezését is.<sup>1</sup>

Az előadó még 2006-ban felkérést kapott arra, hogy a 2008-as budapesti kémiai diákolimpiát előkészítő tudományos bizottságban részt vegyen. Ekkor vált nyilvánvalóvá, hogy az ilyen kinetika játékból a középiskolások számára a nemzetközi verseny sajátos stílusában is kiadható feladat készíthető, amely helyet is kapott az elméleti fordulóban.<sup>2</sup>



**7.8** Write balanced chemical equations for the reactions that occur in the region where the absorbance increases at 465 nm, and in the region where the absorbance decreases at 465 nm.

Calculate the expected time for the maximum absorbance of the kinetic curve measured at 465 nm.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönöm Fábián Istvánnak, hogy hosszú éveken át először témavezetőm, majd kutatótársam volt, és folyamatosan támogatott abban, hogy a saját kutatási érdeklődésemet kövessem.

<sup>1</sup> Lente G., Fábián I., *Inorg. Chem.*, **2004**, *43*, 4019-4025.

<sup>2</sup> *The Competition Problems From The International Chemistry Olympiads. Volume 2 21st – 40th IChO 1989 – 2008*, Anton Sirota (Ed.), **2009**, IUVENTA, Bratislava. (Internet-elérés: <https://icho.sk/competition-problems/>)

# Metalloenzim alapú antioxidáns komplexek

*Lih Norbert<sup>1,2</sup>*

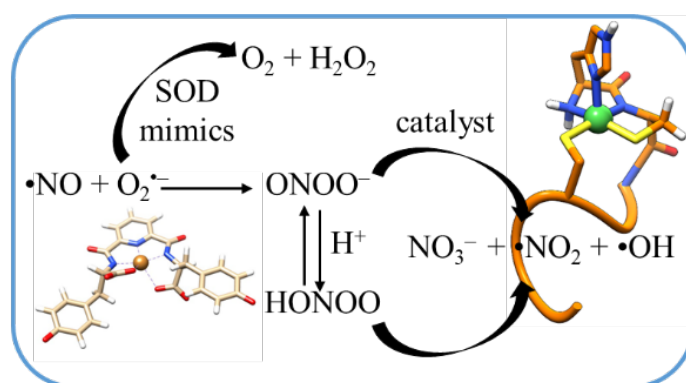
<sup>1</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, <sup>2</sup> HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

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

A szuperoxid gyökkanion a mitokondriális légzési lánc során a molekuláris oxigén egyelektronos redukciójával képződik. Mennyiségének nagymértékű emelkedése oxidatív stresszt idéz elő, továbbá diffúziókontrollált reakciója nitrogén-monoxiddal peroxinitrit anion képződését eredményezi. A szuperoxid- és peroxinitrit-anionok rendkívül reaktív köztitermékei a biológiai folyamatoknak. Nagy mennyiségben DNS károsodást, tumoros sejtek proliferációját és gyulladásos betegségeket okozhatnak. Kutatómunkánk középpontjában olyan enzimek és modellvegyületeinek tanulmányozása áll, amelyek ezen reaktív részecskék lebontását katalizálják. Ezen belül is részletesen vizsgáljuk a nikkelt tartalmazó szuperoxid-dizmutáz enzimet (NiSOD) és annak metallopeptid modelljeit, valamint a réz/cink ionokat tartalmazó szuperoxid-dizmutáz enzim kis molekulatömegű funkcionális modelljeit.

Az előadás során ezen kutatómunka legújabb eredményeit mutatjuk be, különös tekintettel az alábbi témakörökre:

- (Ty) NiSOD-ot modellező metallopeptidek szuperoxid-dizmutáz aktivitása.
- (U) A NiSOD első kilenc aminosav egységéből álló metallopeptid reakciója peroxinitrittel.
- (Ty) Bizonyítottan antioxidáns tulajdonságú kismolekulák hisztidin konjugátumai, mint a réz/cink SOD funkcionális modelljei.
- (U) Piridin-karboxamid alapú ligandumok réz(II)-komplexei.
- (70) Aerogél hordozón rögzített réz(II)- és mangán(II)-komplexek.



**Köszönetnyilvánítás:** A szerző köszönetét fejezi ki az anyagi támogatásért a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) STARTING25-152343 pályázatának.

# Peptidek fémkomplexei: tioamidoktól a tau fragmensekig

*Várnagy Katalin*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

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

Az előadásban áttekintem az elmúlt negyven évben a peptid-komplexek területén végzett kutatásaink fő irányait.

A középpontban a kén-donoratomokat, illetve imidazolgyűrűt tartalmazó peptidek és peptidszármazékok fémionokkal (elsősorban réz(II), nikkel(II) és cink(II)-ionokkal) alkotott komplexei álltak. Kezdetben a tioamidcsoportot, illetve ciszteint tartalmazó di- és tripeptidek koordinációs kémiai sajátosságait jellemeztük. Ezt követően a kötőszövetet bontó kollagenáz enzim potenciális inhibitoraként kezdtünk egy olyan vegyületcsalád vizsgálatába, amely erős cink-kötőhelyet tartalmaz és modellezi az enzim által hasított szubsztrátot vagy annak a hasadó kötés körüli környezetét. Ezek a peptidszármazékok a C-terminális részen egy bisz-imidazolilcsoportot tartalmaztak.

Jelenlegi kutatásaink a neurodegeneratív betegségekben szerepet játszó tau protein fragmenseinek vizsgálatára irányulnak. A tauopátiákat az agyban kialakuló extracelluláris fehérje lerakódások és a hiperfoszforilált tau intracelluláris aggregátumai jellemzik. A neurodegeneratív folyamatok kialakulásában az egyébként nélkülözhetetlen fémionok (például a cink és a réz) fontos szerepet játszanak. A tau fehérjében 12 hisztidin és 2 cisztein jól elosztva helyezkedik el, és különböző kémiai környezetben fordul elő, így feltételezhetjük, hogy fémkötő tulajdonságaik eltérőek. Jelenleg – kicsit visszatérve a kezdetekhez – a ciszteint és/vagy hisztidint tartalmazó tau fragmensek fémkomplexei kerültek a vizsgálataink középpontjába. A modell peptidek koordinációs kémiai tulajdonságainak meghatározása mellett a fémkomplexek hidrolitikus és redoxi sajátosságainak jellemzése is célunk.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatást a Debreceni Egyetem Publikációs Tudománytámogatási Programja és a Debreceni Egyetem Tudományos Kutatási Alapja (DETKA), valamint a CNR és az MTA közötti bilaterális projekt (Di Natale/Várnagy, 2023-2025, B53C23000650005, NKM-2023/24) támogatta.

# Fémionok kölcsönhatása peptidekkel; komplexbépződés és fémionkatalizált oxidáció

*Kállay Csilla*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

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

Előadásomban áttekintést szeretnék nyújtani a Debreceni Egyetem Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoportjában eddig eltöltött éveim kutatási irányairól és főbb eredményeiről.

Az oldategyensúlyi vizsgálatokat  $\epsilon$ -lizin keresztkötést tartalmazó oligopeptidek réz(II)-, nikkel(II)- és cink(II)ionokkal való komplexképződésének tanulmányozásával kezdtem. Diplomamunkám során aszparaginsavat, illetve glutaminsavat tartalmazó bisz(imidazol-2-il)-származékok komplexképzését vizsgáltam. PhD éveim alatt az oldalláncbéli karboxilát- és imidazolilcsoportok komplexképződésre gyakorolt hatása állt kutatásaim középpontjában. Ezen vegyületek egy része a Cu,Zn-szuperoxid-diszmutáz enzim aktív centrumának modellezésére szolgált. Ezt követően egyre hosszabb, a neurodegeneratív betegségekkel kapcsolatba hozható hisztidintartalmú peptidek kerültek érdeklődési körünkbe. A prionbetegséghez köthető prion protein és az Alzheimer-kórhoz köthető  $\beta$ -amiloid peptidek komplexképzésének tanulmányozása mellett kutatásainkat kiterjesztettük ezen peptidek fragmensei fémionkatalizált oxidációjának vizsgálatára is. Az utóbbi években pedig különböző védőmolekulák, mint a gyökfogóként ismert aszkorbinsav és a fémion-fehérje kölcsönhatást gyengítő kismolekulák, – az aroil-hidrazon és szalán típusú vegyületek –, a peptidek oxidációjára gyakorolt hatását vizsgáljuk.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a DE Tudományos Kutatási Alap (DETKA) Áthidaló Pályázat és a Publikációs Tudománytámogatási Program támogatásával valósult meg.

# A ciszteinek pozíciójának hatása az As<sup>III</sup> megkötődésére fehérjék multitiol típusú kötőhelyein: szisztematikus peptid modell vizsgálatok

Tóth Annamária<sup>1</sup>, Lars Hemmingsen<sup>2</sup>, Kele Zoltán<sup>3</sup>, Kaare Teilum<sup>4</sup>, Andreas Prestel<sup>4</sup>,  
Peter Waaben Thulstrup<sup>2</sup>, Jancsó Attila<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>2</sup> Department of Chemistry, University of Copenhagen

<sup>3</sup> Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytani Intézet

<sup>4</sup> Department of Biology, Linderstrøm-Lang Centre for Protein Science, University of Copenhagen

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

Az arzén és vegyületei rendkívül mérgezők, ugyanakkor egyes As<sup>III</sup>-vegyületeknek terápiás alkalmazásai is vannak. Az As<sup>III</sup> kölcsönhatása fehérjék cisztein oldalláncainak tiolcsoportjaival alapvető szerepet játszik a félfém toxikus és terápiás hatásaiban is. Ennek ellenére az As<sup>III</sup> biokémiai folyamatokat befolyásoló hatásmechanizmusának molekuláris részletei nem teljesen tisztázottak. Ennek oka részben az, hogy kevés információ áll rendelkezésre az As<sup>III</sup> és a cisztein tartalmú kötőhelyek közötti kölcsönhatásról, az As<sup>III</sup> koordinációs környezetéről és a megkötődés erősségéről. A fehérje – As<sup>III</sup> kölcsönhatások azonban sok esetben utánozhatók több tiolcsoportot tartalmazó ligandumokkal, ill. a fehérje fémkötőhelyeit modellező rövid láncú peptidekkel.<sup>3,4</sup> A most bemutatott munka célja olyan potenciális As<sup>III</sup>-kötőhelyek modellezése, melyek két cisztein egységet tartalmaznak a fehérjelánc egy viszonylag rövid szakaszán, egymástól különböző távolságban. Ehhez az arzénessav (As<sup>III</sup> vizes oldatbeli formája) kölcsönhatását tanulmányoztuk olyan peptidekkel, melyekben a két cisztein közötti aminosavak száma 0-4 között szisztematikusán változott. Az As<sup>III</sup> megkötődését a peptidekhez a peptid minták As<sup>III</sup>-oldattal történő titrálása révén (vagy fordítva) vizsgáltuk, UV-Vis módszerrel követve a S<sup>-</sup> → As<sup>III</sup> töltésátviteli sávok kialakulását. A kísérletek célja a semleges pH-ra jellemző speciációs viszonyok, valamint a kialakuló komplexek stabilitásának meghatározása volt. A komplexek összetételét, a ligandumok kötődésének módját, ill. a részecskék szerkezetét CD- és NMR-spektroszkópiával, valamint ESI-MS módszerekkel is jellemeztük. A kísérleteink három részecske (AsL, As<sub>2</sub>L<sub>3</sub> és AsL<sub>2</sub>, L = peptid) jelenlétét mutatták ki. A bisz-komplex széles c(As<sup>III</sup>):c(L) tartományban domináns komplex mindegyik rendszerben. A meghatározott stabilitási állandók a két cisztein szekvenciabeli távolságával korreláló tendencia szerint változnak, mely trend tényező lehet az As<sup>III</sup> különböző fehérjék (fél)fémkötő helyei közötti megoszlásában is.

**Köszönetnyilvánítás:** NKFIH ADVANCED\_24 No. 150330; TEMPUS MAEO-2025-26-000179

<sup>3</sup> Szekeres L.I. et al., *Inorg. Chem.*, **2023**, 62, 6817.

<sup>4</sup> Tóth A. et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 125, 2923.

# Lítium-hidroxid előállítását célzó új szintetikus módszerek kidolgozása

Török Péter, Hajdú Erik, *Kutus Bence*

Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék

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

A modern elektromos eszközök Li-NMC (nikkel-mangán-kobalt) vegyesoxid-katódjainak elsődleges kiindulási anyaga a lítium-karbonát ( $\text{Li}_2\text{CO}_3$ ), melyet hagyományosan ércek tömény kénsavas, magas hőmérsékletű feltárását, illetve lítiumtartalmú sósvizek bepárlását követően nátrium-karbonáttal nyernek. A katódgyártásban a  $\text{Li}_2\text{CO}_3$ -ot azonban fokozatosan felváltja a lítium-hidroxid-monohidrát ( $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$ ), utóbbi ugyanis alacsonyabb szintézishőmérsékletet, ezáltal nagyobb szerkezeti stabilitást biztosít [1,2]. A LiOH előállítása hagyományosan  $\text{Li}_2\text{CO}_3$ -ból történik  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -dal; a reakció hozama tömény szuszpenziók feldolgozása esetén alacsony; az elérhető legmagasabb koncentráció  $\sim 1,5$  mol/L LiOH [1,3]. Bár számos más – extrakciós, elektrokémiai, pirometallurgiai – eljárás létezik, továbbra is az oltott meszes reakció az ipari léptékben alkalmazott technológia. A hagyományos eljárások mind környezetvédelmi (kénsavas feltárás), mind hatékonysági (oltott meszes reakció) szempontból hátrányosak, ezért jelen kutatás célja olyan hidrometallurgiai szintézismódszerek kidolgozása, melyek (1) megnövelik a  $\text{Li}_2\text{CO}_3$ -ból történő LiOH előállítás hozamát, illetve (2) lehetővé teszik a hidroxid egy lépésben történő előállítását, karbonát köztitermék nélkül. A megfelelő hozam mellett fontos szempont ezenkívül olyan reakciók tervezése, melyek olcsó alapanyagokat igényelnek, vizes közegben és alacsony hőmérsékleten játszódnak le, valamint a termék  $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$  tisztasága is megfelel a katódgyártás követelményeinek.

A projekt négy fő kutatási területre osztható: (1) az oltott meszes eljárás során képződő lítium-karbonát ionpárok képződési egyensúlyainak vizsgálata, (2) bárium-hidroxid, mint alternatív reagens használata LiOH előállítására, (3) egy lépéses szintézisek kidolgozása LiCl- és LiF-oldatok átalakítására, (4) a kénsavas feltárást helyettesítő reakció kidolgozása és tesztelése lítiumtartalmú ércre vonatkozóan.

A kutatás során fontos szerepet kap a reakciók sebességének, egyensúlyi viszonyainak, illetve az oldat- és szilárd fázisok összetételének vizsgálata. Előadásomban a főbb kutatási irányok ismertetése mellett legfrissebb eredményeink is bemutatásra kerülnek.

[1] Liu H., Azimi G., *Resour. Conserv. Recycl.*, **2022**, 179, 106115.

[2] Lappalainen H., et al., *Miner. Eng.*, **2024**, 209, 108632.

[3] Török P., et al., *Inorg. Chem.*, **2025**, 64, 23575–23585.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás pénzügyi támogatásáért köszönetet mondunk a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak és a Nemzeti Kutatási Kiválósági Programnak (STARTING #152917).

# Átmenetifém-komplexek mint a Gd(III)-alapú MRI kontrasztanyagok biztonságosabb alternatívái: tervezés, előállítás és kémiai jellemzés

*Tircsó Gyula*

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, Debrecen

e-mail: gyula.tircso@science.unideb.hu

Az átmenetifémionok komplexei kedvező fizikokémiai tulajdonságaik és kisebb toxicitásuk miatt a széles körben alkalmazott Gd(III)-alapú MRI-kontrasztanyagok ígéretes alternatívái lehetnek. Az elmúlt másfél évtizedben jelentősen felgyorsult az esszenciális fémionokon alapuló MRI-kontrasztanyag-jelöltek kutatása, azonban mindmáig nincs konszenzus arra vonatkozóan, hogy mely ligandumcsalád(ok) a legalkalmasabb(ak) a Mn(II)-, illetve Fe(III)-ionok stabil és inert komplexálására. E kérdéskör vizsgálatára nyert támogatást kutatócsoportunk az NKFIH K-134694 pályázat keretében. A projekt négy fő célkitűzést fogalmazott meg: 1). Korábbi vizsgálataink alapján már ismert volt, hogy a 12-tagú makrociklusokban piridincsoportot tartalmazó ligandumok különösen ígéretesek Mn(II)-ionok komplexálására. Ennek megfelelően célunk volt annak feltérképezése, hogy a kisebb gyűrűméretű 1,4,7-triazaciklononán (tacn), illetve az azonos méretű, de eltérő heteroatomokat tartalmazó makrociklusok (O-piklén és biszpiklén) miként befolyásolják a képződő komplexek fizikokémiai tulajdonságait. Az acetát oldalláncok mellett pikolil-, pikolinát-, furinát-, 8-hidroxi-kinolinát-, malonát- és fenolát-típusú donorcsoportokat alkalmaztunk; 2). Bár a szakirodalomban már ismertek nagyobb üregméretű (14- és 15-tagú) makrociklusos ligandumok, a BP2A ligandum Mn(II)-komplexének röntgenszerkezete alapján felmerült ezen rendszerek és a 12-tagú makrociklusok fúziójának lehetősége. Ez egy új, kriptát jellegű ligandumcsalád előállítását és vizsgálatát tette lehetővé; 3). A legígéretesebb ligandumplatformok integrálása intelligens, szerspecifikus, illetve bifunkciós kelátorok szerkezetébe célzott diagnosztikai alkalmazások fejlesztése érdekében, valamint a relaxációs tulajdonságok finomhangolása; 4) Végül, a más fémionok (pl. Cu(II), Fe(II)) komplexálására már sikeresen alkalmazott biszpidin ligandumcsalád új képviselőinek előállítását, valamint Mn(II)-komplexeik fizikokémiai jellemzését. Az előadás a projekt megvalósítása során elért legfontosabb eredményeket tervezi bemutatni.

**Köszönetnyilvánítás:** Kutatásainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-134694 és Advanced25 152778 sz. pályázataival, valamint az EKÖP-24-0 kódszámú egyetemi kutatói ösztöndíj programja, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatással biztosította.

## 8-hidroxi kinolin fémkötő oldalláncot tartalmazó makrociklusos ligandumok előállítására és vizsgálata diagnosztikai alkalmazásokhoz

Kapus István<sup>1,2</sup>, Váradi Balázs<sup>2</sup>, Csupász Tibor<sup>2</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>2</sup>, Bunda Szilvia<sup>2</sup>, Garda Zoltán<sup>2</sup>, Lihi Norbert<sup>3</sup>, May Nóra Veronika<sup>4</sup>, Tircsó Gyula<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Debreceni Egyetem, Kémiai Tudományok Doktori Iskola, Debrecen

<sup>2</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, Debrecen

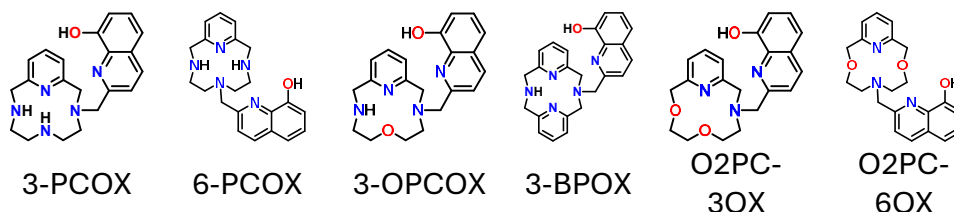
<sup>3</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Tanszék, Debrecen

<sup>4</sup> HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

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

A mágneses rezonanciás képalkotás (MRI) napjaink egyik legfontosabb diagnosztikai képalkotó módszere, amely hatékonysága nagymértékben függ az alkalmazott kontrasztanyagoktól. A klinikumban használt Gd(III)-alapú kontrasztanyagokkal kapcsolatos aggályok miatt az utóbbi években előtérbe kerültek az esszenciális fémionokat, elsősorban Mn(II)- és Fe(II)/Fe(III)-ionokat tartalmazó komplexek. A 8-hidroxi kinolin jól ismert kétfogú fémkötő egység, amely számos nyítláncú ligandum szerkezetébe beépítettek a komplexképző tulajdonságok javítása érdekében.<sup>1-4</sup>

Doktori kutatómunkám során hat, monoszubsztituált 8-hidroxi kinolin oldalláncot tartalmazó merevázú makrociklusos ligandumot állítottam elő, és elsősorban Mn(II)-komplexeik fizikokémiai tulajdonságait vizsgáltuk. A [Mn(3-PCOX)]<sup>+</sup> és [Mn(6-PCOX)]<sup>+</sup> -komplexeik összehasonlítása lehetőséget adott annak feltárására, hogy a ligandum szerkezeti izomériája miként befolyásolja a képződő komplexek termodinamikai stabilitását, inertségét, és relaxációs tulajdonságait, és melyik ligandumplatform alkalmasabb a Mn(II)-ionok komplexálására. A kutatás későbbi szakaszában az inertség növelése érdekében módosítottuk a makrociklusos váz szerkezetét, melynek eredményeként sikerült előállítani az O-piklén- és biszpiklén-alapú [Mn(3-OPCOX)]<sup>+</sup> és [Mn(3-BPOX)]<sup>+</sup> -komplexeiket. Ezek mellett két új, az irodalomban nem ismert makrociklusos platform szintézisét is megvalósítottuk, amelyekhez 8-hidroxi kinolin oldalláncot kapcsoltunk és vizsgáltuk a képződő Mn(II)-komplexeiket. Az előadás során a ligandumok és komplexeik szintézisét, valamint a meghatározott fizikokémiai paraméterek (termodinamikai stabilitás, inertség és relaxitás) összehasonlító elemzését tervezem bemutatni.



**1. ábra:** Az előadásban bemutatott ligandumok szerkezetei

**Köszönetnyilvánítás:** Kutatásainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-134694 és Advanced25 152778 sz. pályázatai, valamint az EKÖP-24-0 kódszámú egyetemi kutatói

1 Prachayasittikul, V et al. (2013) Drug Design, Development and Therapy, 1157. <https://doi.org/10.2147/dddt.s49763>

2. Wang, X et al. (2018). Inorganic Chemistry, 58(4), 2275–2285. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b01208>

3. Southcott, L et al (2021). Inorganic Chemistry, 60(16), 12186–12196. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c01412>

4. Choudhary, N et al. (2021). RSC Advances, 11(26), 15663–15674. <https://doi.org/10.1039/d1ra01793d>

ösztöndíj programja, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatással biztosította.