

A tantárgy neve:	magyarul:	<b>Makrociklusos ligandumok komplexei</b>						Kódja:	TTKME0212	
	angolul:	<b>Complexes of macrocyclic ligands</b>								
Felelős oktatási egység:		<b>DE TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék</b>								
Kötelező előtanulmány neve:								Kódja:		
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	x	Heti	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		<b>Dr. Tircsó Gyula</b>				beosztása:	<b>egyetemi adjunktus</b>	
<b>A kurzus célja</b> , hogy a hallgatók betekintést nyerjenek a makrociklusos komplexképzők előállításának, vizsgálatának és egyre szélesebb körű alkalmazásainak módszereibe/területeire.										
<b>Tanulás eredmények, kompetenciák:</b> a hallgató										
<i>Tudás:</i> Ismeri a makrociklusos ligandumokra és komplexeire általánosan, azon belül a különböző csoportokra, illetve az egyes vegyületekre konkrétan jellemző tudományosan alátámasztott törvényszerűségeket, sajátosságokat, tulajdonságokat, előállításokat, fontosabb vegyületeket, a legfontosabb gyakorlati alkalmazásukat/alkalmazhatóságukat, ill. az élettelen természetben és az élő szervezetekben betöltött igazolt szerepüket.										
<i>Képesség:</i> - Képes rendszer szinten átlátni, értelmezni, alapvető feladatok kapcsán alkalmazni a makrociklusos ligandumok és komplexeire vonatkozó ismereteket. - Képes a makrociklusos ligandumok és komplexeikről megismert gyakorlati alkalmazásukról folytatott szakmai kommunikációban érdemben részt venni, ebben mind írásban. - Képes a makrociklusos kelátorok és kelátjaikkal kapcsolatos ismereteinek kibővítésére/továbbfejlesztésére.										
<i>Attitűd:</i> Nyitott arra, hogy a makrociklusos ligandumok témakörében, ill. a saját tudományterületéhez közvetlenül vagy közvetetten kapcsolódó kémiai területeken, új tudományosan bizonyított ismereteket szerezzen, de elutasítsa a megalapozatlan, esetleg megtévesztő állításokat.										
<i>Autonómia és felelősség:</i> Szakmai irányítás mellett megjelölt részfeladatokat önállóan képes a kurzusban szereplő témakörök kapcsán elvégezni, a kapott eredményt értelmezni, valamint reálisan értékelni.										
<b>A kurzus tartalma, témakörei</b>										
- A makrociklusos komplexképzők felfedezése, a ligandumok típusai, nevezéktana. - A makrociklusos gyűrűk kialakítására használt szintetikus eljárások (a nagy hígítási technika, a Richman-Attkins szintézis, a templát szintézis, a peptidszintézis, zip-reakció, stb.). - C- és N-funkcionalizált és szubsztituált makrociklusok előállítása, az alkalmazott származékképzési reakciók. Bifunkciós ligandumok előállításának lehetőségei. - Koronaéterek, kriptandok és funkciócsoportokkal rendelkező makrociklusok komplexképző sajátosságai, a komplexek szerkezete. Szupramolekuláris kémia alapjai. - A ligandumok szelektivitása és a makrociklusos effektus. A makrociklushoz kapcsolt funkciócsoport szerepe a szelektivitásban és a komplexek stabilitásában. - A makrociklusos ligandumok és komplexeiknek vizsgálatai módszerei. A komplexek stabilitását befolyásoló tényezők (az üregméret, a donatoratomok minősége, stb.). A makrociklusos ligandumok komplexeinek képződési- és bomlás-kinetikai sajátosságai. A képződési- és bomlás-kinetikai paraméterek finomhangolása a makrociklus és az oldalláncok megfelelő megválogatásával. - A makrociklusos komplexképzők gyakorlati alkalmazásai: analitikai (fémionok koncentrációjának meghatározása, fémionok elválasztása/extrakciója), orvosi/biológiai alkalmazások (MRI kontrasztanyagok, NMR shift reagensek, radiofarmakonok, optikai képalkotó módszerek kontrasztanyagai), szelektív komplexképzésen alapuló eljárások (toxikus fémionok eltávolítása, fémion háztartás befolyásolása), szerves kémiai (fázisátvitel katalizátorok, ionoforok, stb.) alkalmazások.										

**Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek**

- Előadás
- Rövid írásbeli beszámoló elkészítése és bemutatása (egyeztetett témában és időpontban)

**Értékelés**

Órai munka (20 %)

Kollokvium (80 %)

Jeles: 87%, jó: 75 %, közepes 62 %, elégséges: 50 %, 50 % alatt elégtelen

- A hallgatók egymás beszámolóiról/bemutatóiról a tanóra végén (az órai vitát, megbeszélést figyelembe véve) értékelést adnak
- A tantárgyat kollokvium zárja

Sikertelen teljesítés esetén a javítás módja, határideje: a munkakövetelményk utólagos pótlására külön eljárásban nincs lehetőség. A kollokvium sikertelensége esetén javítás, utóvizsga keretében történhet, a TVSZ-ben rögzítettek szerint.

**Kötelező olvasmány:**

1. Melson G. A., Coordination Chemistry of Macrocyclic Compounds, Springer, 1979.
2. Lindoy L.F., Chemistry of macrocyclic ligand complexes, Cambridge University Press, 1989.
3. Bradshaw, J. S., Krakowiak, K. E., Izatt, R M. Aza-crown macrocycles, John Wiley and Sons, 1993

**Ajánlott szakirodalom:**

1. Gloe, K., Macrocyclic Chemistry: Current Trends and Future Perspectives, Springer, Dordrecht, The Netherlands, 2005.
2. Dodziuk, H., Cyclodextrins and Their Complexes: Chemistry, Analytical Methods, Applications, John Wiley and sons, Weinheim, Germany, 2006.
3. Diederich, F., Stang, P. J., Tykwinski R. R., Modern Supramolecular Chemistry, ohn Wiley and sons, Weinheim, Germany, 2008.
4. Suchy, M. Hudson, R. H. E., *Eur. J. Org. Chem.*, **2008**, 29, 4847–4865.
5. Lattuada, L. Barge, A., Cravotto, G., Giovenzana, G. B., Tei, L., *Chem. Soc. Rev.*, **2011**,40, 3019-3049.

Heti bontott tematika	
1. hét	A makrociklusos ligandumok történelmi aspektusai: a makrociklusos komplexképzők felfedezése, előállításuk története. A makrociklusos vegyületek típusai, nevezéktana. <hr/> TE: tisztában van a makrociklusos vegyületek előállításának legfontosabb mérföldkövével. Ismeri a makrociklusos ligandumok típusait, nevezéktanát.
2. hét	A makrociklusos gyűrűk kialakítására használt szintetikus eljárások (a nagy hígításos technika, a Richman-Attkins szintézis, a templát szintézis, a peptidszintézis, zip-reakció, stb.) összehasonlító áttekintése. <hr/> TE: ismeri a makrociklusos ligandumok előállításának legfontosabb módszereit és képes ezek közül egy adott vegyület esetében leginkább kézenfekvő/alkalmazható eljárást választani.
3. hét	C- és N-funkcionalizált és szubsztituált makrociklusok előállítása, az alkalmazott származékképzési reakciók. <hr/> TE: ismeri a makrociklusos ligandumok C- és N-funkcionalizált makrociklusok előállításának módszereit.
4. hét	Mono-, bisz-, trisz- és tetra- helyettesített triaza és tetraaza makrociklusos komplexképzők előállítása. <hr/> TE: ismeri a mono-, bisz-, trisz- és tetra- helyettesített N-funkcionalizált triaza és tetraaza makrociklusos komplexképzők előállításának módszereit.
5. hét	A bifunkciós ligandumok típusai, előállításuk és a összehasonlító jellemzésük. A kapcsolást elősegítő funkciós csoport helyzetének a hatás a komplexek legfőbb jellemzőire. <hr/> TE: ismeri a bifunkciós (többfunkciós) ligandumok típusait. Tisztában van kémiaailag reaktív

	csoport helyzetének a komplexek jellemzőire gyakorolt hatásával.
6. hét	<p>Makrociklusos vegyületek (koronaéterek, kriptandok és funkciócsoportokkal rendelkező makrociklusok) komplexképző sajátosságai, a komplexek szerkezete. Szupramolekuláris kémia alapjai. Molekuláris legők.</p> <hr/> <p>TE: ismeri a makrociklusos ligandumok és komplexeik sajátosságait. Tisztában van a szupramolekuláris kémia alapjaival.</p>
7. hét	<p>A ligandumok szelektivitása és a makrociklusos effektus. A makrociklushoz kapcsolt funkciócsoportok szerepe a szelektivitásban és a komplexek stabilitásában.</p> <hr/> <p>TE: ismeri a kelát és a makrociklusos effektusok, ill. a szelektivitás fogalmakat, ezek szemléltetésére megfelelő példákkal tud szolgálni.</p>
8. hét	<p>A makrociklusos ligandumok és komplexeiknek vizsgálatai módszerei.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a komplexek vizsgálatakor legelterjedtebben alkalmazott módszereket, ezek közül egy konkrét rendszer esetére képes a megfelelő módszer kiválasztására.</p>
9. hét	<p>A komplexek stabilitását befolyásoló tényezők (az üregméret, a donoratomok minősége, stb.). A makrociklusos ligandumok komplexeinek képződési- és bomlás-kinetikai sajátosságai. A képződési- és bomlás-kinetikai paraméterek finomhangolása a makrociklus és az oldalláncok megfelelő megválogatásával.</p> <hr/> <p>TE: ismeri a makrociklus üregméretének a makrociklusban elhelyezkedő donoratomok minőségének és mennyiségének a hatását a képződő komplexek fizikai-kémiai jellemzőire (a kelátok stabilitására, a komplexek képződésének, ill. bomlásának a sebességére), képes ezeket a paramétereket befolyásolni (hangolni) az előzőek megfelelő megválogatásával</p>
10. hét	<p>A makrociklusos komplexképzők gyakorlati alkalmazásai 1: analitikai (fémionok koncentrációjának meghatározása, fémionok elválasztása/extrakciója), szelektív komplexképzésen alapuló eljárások (toxikus fémionok eltávolítása, fémion háztartás befolyásolása), szerves kémiai (fázistranszfer katalizátorok, ionoforok, stb.) alkalmazások.</p> <hr/> <p>TE: ismeri a makrociklusos komplexek legfőbb analitikai alkalmazásait.</p>
11. hét	<p>A makrociklusos komplexképzők gyakorlati alkalmazásai 2: orvosi biológiai alkalmazások (MRI kontrasztanyagok, NMR shift reagensek, radiofarmakonok, optikai képalkotó módszerek kontrasztanyagai).</p> <hr/> <p>TE: ismeri a makrociklusos ligandumok komplexeinek orvosi biológiai alkalmazásait.</p>
12. hét	<p>A makrociklusos ligandumok alkalmazás orientált tervezése és előállítása.</p> <hr/> <p>TE: Felismeri a makrociklusos ligandumok alkalmazásával kapcsolatos problémákat és képes javaslatokat tenni ezek kikerülésére/javítására.</p>
13. hét	<p>Hallgatói beszámolók/bemutatók.</p> <hr/> <p>TE: A beadott dolgozatok/elkészített előadások bemutatása és közös megbeszélése.</p>
14. hét	<p>-</p> <hr/> <p>TE:</p>