



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-19-0087

Bioaktívne komplexy prechodných kovov s magnetickou bistabilitou

Zodpovedný riešiteľ **doc. Ing. Ivan Šalitroš, PhD.**

Príjemca

Slovenská technická univerzita v Bratislave - Fakulta chemickej a potravinárskej technológie

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

žiadateľ: Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská Technická univerzita
partnerské organizácie:

1. Fakulta prírodných vied, Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave
2. Fakulta prírodných vied a informatiky, Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

- Laboratories of Coordination Chemistry (LCC), Toulouse, Francúzsko
- Institute for Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Nemecko
- Institute for Nanostructured Materials, Bologna, Taliansko
- University of Hull, Veľká Británia
- Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc, Česká republika
- Vysoké učení technické v Brne, Brno, Česká republika

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

Počas riešenia projektu neboli podané ani uplatnené žiadne patenty, vynálezy a úžitkové vzory. Projekt bol zameraný na základný výskum a výstupmi projektu sú publikácie najmä v medzinárodných karentovaných CC časopisoch.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1.02 Publikácie v zahraničných karentovaných časopisoch

[1]

Low-Spin and Spin-Crossover Iron(II) Complexes with Pyridyl-benzimidazole Ligands: Synthesis,

Structural, Magnetic and Solution study

B. Brachňaková, J. Adamko Kožíšková, J. Kožíšek, E. Melníková, M. Gál, R. Herchel, T. Dubaj, I. Šalitroš,

Dalton Trans. 2020, 49,17786-17795.

DOI: 10.1039/D0DT03497E

[2]

Spin crossover metal – organic frameworks with inserted photoactive guests: on the quest to control the spin state by photoisomerization

B. Brachňaková, J. Moncol, J. Pavlik, I. Šalitroš, S. Bonhommeau, F. Javier Valverde-Muñoz, L. Salmon, G. Molnár, L. Routaboul, A. Bousseksou.

Dalton Trans., 2021, 50, 8877–8888.

DOI:10.1039/d1dt01057c

[3]

Chiral Resolution of Spin-Crossover Active Iron(II) [2x2] Grid Complexes.

N. Suryadevara, A. Pausch, E. Moreno-Pineda, A. Mizuno, J. Bürck, A. Baksi, T. Hochdörffer,

I. Šalitroš, A. S. Ulrich, M. M. Kappes, V. Schünemann, W. Kloppe, M. Ruben.

Chem. Eur. J. 2021, 27, 15172–15180.

doi.org/10.1002/chem.202101432

[4]

2-Propargylamino-naphthoquinone derivatives as multipotent agents for the treatment of Alzheimer's disease.

E. Mezeiova, J. Janockova, R. Andrys, O. Soukup, T. Kobrlova, L. Muckova, J. Pejchal, M. Simunkova, J. Handl, P. Micankova, J. Capek, T. Rousar, M. Hrabnova, E. Nepovimova, J. L. Marco-Contelles, M. Valko, J. Korabecny.

Eur. J. Med. Chem. 2021, 211, 113112.

DOI: 10.1016/j.ejmech.2020.113112

[5]

The effect of Luteolin on DNA damage mediated by a copper catalyzed Fenton reaction .

K. Jomova, L. Hudecova, P. Lauro, M. Simunkova, Z. Barbierikova, M. Malcek, S. H. Alwasel, I. M. Alhazza, C. J. Rhodes, M. Valko.

J. Inorg. Biochem. 2022, 226, 11635.

DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2021.111635

[6]

Electronic structure of Schiff-base peroxo{2,2 000 -[1,2-phenylenebis (nitrilomethanylylidene)] bis(6-meth-oxyphenolato)}titanium(IV) monohydrate: a possible model structure of the reaction center for the theoretical study of hemoglobin.

J. Adamko Koziskova, M. Breza, M. Valko, Peter Herich, L Bučinský, J. Kožíšek.

IUCrJ 2021, 8, 295–304.

DOI: 10.1107/S205225252100004X

[7]

Pentacoordinate Cobalt(II) Single Ion Magnets with Pendant Alkyl Chains: Shall We Go for Chloride or Bromide?

J. Juráková, J. Midlíková, J. Hrubý, A. Kliuikov, V.T. Santana, J. Pavlik, J. Moncol',; E.

Čižmár, M. Orlita, I. Mohelský, P. Neugebauer, D. Gentili, M. Cavallini, I. Šalitroš,

Inorg. Chem. Front. 2022, 9, 1179-1194

DOI: 10.1039/D1QI01350E

[8]

The effect of Luteolin on DNA damage mediated by a copper catalyzed Fenton reaction

K. Jomova, L. Hudecova, P. Lauro, M. Simunkova, Z. Barbierikova, M. Malcek, S. H.

Alwasel, I. M. Alhazza, C. J. Rhodes, M. Valko.

J. Inorg. Biochem. 2022, 226, 111635.

DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2021.111635

[9]

In vitro biological activity of copper(II) complexes with NSAIDs and nicotinamide:

Characterization, DNA- and BSA-interaction study and anticancer activity.

F. Jozefikova, S. Perontsis, K. Konarikova, L. Svorc, M. Mazúr, G. Psomas, J. Moncol.

J. Inorg. Biochem. 2022, 228, 111696

DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2021.111696

[10]

Anticancer half-sandwich Ir(III) complex and its interaction with various biomolecules and their

mixtures – a case study with ascorbic acid Co(II) single- ion magnets: synthesis, structure, and magnetic properties

L. Masaryk, J. Orvoš, K. Słoczyńska, R. Herchel, J. Moncol, D. Milde, P. Halaš, R.

Křikavová, P. Koczurkiewicz-Adamczyk, E. Pękała, R. Fischer, I. Šalitroš, I. Nemeš, P. Štarha.

Inorg. Chem. Front., 2022, 9, 3758-3770.

DOI: 10.1039/d2qi00535b

[11]

Unusual slow magnetic relaxation in a mononuclear copper(II) complex

D. Valigura, C. Rajnak, J. Titis, J. Moncol, A. Bienko, R. Boca

Dalton Trans. 2022, 51, 5612–5616.

DOI: 10.1039/d2dt00023g

[12]

Neutral cobalt(II)-bis(benzimidazole)pyridine field-induced single-ion magnets for surface deposition

Jurakova, J; Fellner, OF; Schlittenhardt, S; Vavreckova, S; Nemec, I; Herchel, R; Cizmar, E; Santana, VT; Orlita, M; Gentili, D; Ruani, G; Cavallini, M; Neugebauer, P; Ruben, M; Salitros, I.

Inorg. Chem. Front. 2023, 10, 5406.

DOI: 10.1039/d3qi00931a

[13]

Impact of the central atom and halido ligand on the structure, antiproliferative activity and selectivity of half-sandwich Ru(II) and Ir(III) complexes with a 1,3,4-thiadiazole-based ligand
Krikavova, R; Romanovova, M; Jendzelovska, Z; Majernik, M; Masaryk, L; Zoufaly, P; Milde, D; Moncol, J; Herchel, R; Jendzelovsky, R; Nemec, I.

Dalton Trans. 2023, 52, 12717.

DOI:10.1039/d3dt01696j

[14]

Pyridyl-Benzimidazole Derivatives Decorated with Phenylazo Substituents and their Low-Spin Iron(II) Complexes: Synthesis, Structural and Photoisomerization Study.

Orvoš, J.; Fischer, R.; Brachňáková, B.; Pavlik, J.; Moncol, J.; Šagátová, A.; Fronc, M.; Kožíšek, J.; Routaboul, L.; Bousseksou, A.; Šalitroš, I.

New J. Chem. 2023, 47, 1488-1497.

DOI:10.1039/D2NJ04774H

[14]

Slow magnetic relaxation in two mononuclear Mn(II) complexes not governed by the over-barrier Orbach process

Micova, R; Rajnak, C; Titis, J; Samolova, E; Zalibera, M; Bienko, A; Boca, R.

Chem. Commun. 2023, 59, 18, 2612.

DOI:10.1039/d2cc06510j

[15]

Facile One-Step Oxidation of N-Boc-Protected Diarylhydrazines to Diaryldiazenes with (Diacetoxyiodo)benzene under Mild Conditions.

Orvos, J; Pancik, F; Fischer, R.

Eur. J. Org. Chem. 2023, 26, e20230004

DOI:10.1002/ejoc.202300049

[16]

The effect of Cu(II) ion on antioxidant and DNA-binding mechanism of baicalein and scutellarein: Spectroscopic, theoretical, and molecular docking study

M. Malček Šimunková, M. Štekláč, R. Raptová, P. Gajdoš, M. Čertík, M. Malček; Appl. Organomet. Chem., 2024, 38, e7390.

DOI: 10.1002/aoc.7390

[17]

Lattice solvent- and substituent-dependent spin-crossover in isomeric iron(II) complexes.

S. K. Kuppusamy, A. Mizuno, L. Kämmerer, S. Salamon, B. Heinrich, C. Bailly, I. Šalitroš, H. Wende, M. Ruben; Dalton Trans., 2024, 53, 10851–10865.

DOI: 10.1039/D4DT00429A

[18]

Magnetic properties of a europium(III) complex –possible multiplet crossover

R. Mičová, Z. Bielková, C. Rajnák, J. Titiš, J. Moncol, A. Bieňko, R. Boča;

Dalton Trans., 2024, 53, 1492–1496.

DOI: 10.1039/d3dt03901c

[19]

A heptanuclear {Dy₂Cu₅} complex as a single-molecule magnet

R. Mičová, C. Rajnák, J. Titiš, J. Moncol, J. Nováčiková, A. Bieňko, R. Boča;

Dalton Trans., 2024, 53, 5147–5151.

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky dosiahnuté počas riešenia projektu Biomagnet budú mať významný vplyv na spoločnosť, otvárajúc možnosti miniaturizácie elektronických a spintronických zariadení, pričom sa zachová environmentálna nezávadnosť a priamo sa zabezpečí nízkoenergetická spotreba elektrickej energie. Pripravené a študované spin-crossover komplexy a jednomolekulové magnety umožnia vytvárať novú generáciu pamäťových nosičov, zvyšujúc tak plnú konektivitu a rozšírené stratégie na detekciu základnej jednotky informácie (1 bit), s potenciálnym významom v mnohých disciplínach vrátane materiálových vied, inžinierstva, obrany, vesmíru a medicíny. Inovatívny predpoklad pre molekulovú elektroniku, spintroniku a spracovanie kvantových informácií umožní modernej spoločnosti pokročiť vo vývoji vysokokapacitných pamäťových nosičov, senzorov, displejov, či kontrastných látok pre MRI diagnostiku. V rámci riešenia projektu sa charakterizovali komplexy, ktoré obsahujú bioaktívne NSAID liečivá a tak majú potenciálne účinky v medicíne a farmakológii. Na základe nášho výskumu možno konštatovať, že prítomnosť iónov kovov systematicky ovplyvňuje aktivitu a prispieva k zmierneniu vedľajších účinkov organických materských zlúčenín. Okrem toho samotný komplex môže vykazovať bioaktivitu, ktorá nebola pozorovaná pri jednotlivých ligandoch. V niektorých prípadoch môžu malé modifikácie viesť k dramatickým zmenám v chemickom správaní materskej molekuly.

Celkovo predpokladáme, že naša iniciatíva v oblasti vývoja nových jednomolekulových magnetov, spin-crossover zlúčenín a biologicky aktívnych komplexov prechodných kovov prispeje k ovplyvneniu a zlepšeniu spoločnosti, vrátane jej ekonomiky, zdravia a životného prostredia.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Silnou stránkou výskumného projektu BIOMAGNET bol mimoriadne široký multidisciplinárny prístup so sústredením kompetencií do presne definovaného smeru prostredníctvom úzko prepojených výskumných úloh organickej a anorganickej syntézy, kryštalografie, spektrálnych techník, magnetochemie, počítačovej chémie, materiálovej chémie a vyšetrovania biologických vlastností. Hlavným cieľom projektu bolo pochopenie základnej elektrónovej štruktúry a magnetickej povahy koordinačných zlúčenín vo vzťahu k ich biologickým vlastnostiam. Racionálny molekulový dizajn bol aplikovaný pri príprave koordinačných zlúčenín 3d prechodných prvkov obsahujúcich bioaktívne ligandy na báze nesteroidných protizápalových liečiv (NSAID). Takáto stratégia umožnila prípravu vyše 50 nových koordinačných zlúčenín, ktoré boli štruktúrne charakterizované. Na týchto komplexoch sa skúmala i) SOD mimetická a antimikrobiálna aktivita; ii) protirakovinové účinky a iii) magnetická aktivita založená na vratnom prepínaní ich magnetických stavov. Pripravené komplexy boli spektrálne charakterizované a štúdium elektrónových hustôt prispelo ku vysvetleniu ich biologickej a magnetickej aktivity. Výskum biologickej aktivity komplexov spočíval v štúdiu ich schopností zhašať voľné radikály ako aj v štúdiu ich SOD mimetickej aktivity. Interakcia komplexov prechodných kovov s DNA bola študovaná pomocou meraní viskozity a absorpčných titrácií. Magnetické štúdie sa zamerali na identifikáciu magnetickej bistability na báze jednomolekulového magnetizmu alebo spin-crossover efektu. Kvantovomechanické výpočty (DFT, ab initio) boli komplementárne použité na vysvetlenie fundamentálnych magnetických. Navrhnuté komplexy prechodných kovov s NSAID ligandami majú veľký aplikačný potenciál pri vývoji vysokokapacitných pamäťových nosičov, pri konštrukcii displejov, ako kontrastné látky v MRI alebo v medicíne ako liečivá.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku

(max. 20 riadkov)

The main strength of the BIOMAGNET research project lay in its exceptionally broad multidisciplinary approach, concentrating competencies in a precisely defined direction through closely interconnected research tasks of organic and inorganic synthesis, crystallography, spectral techniques, magnetochemistry, computational chemistry, materials chemistry and the investigation of biological properties. Based on this unprecedented multidisciplinary approach, the expected groundbreaking outcome of the BIOMAGNET project was the development of magnetically and biologically active transition metal complexes. The main goal of the project was to understand the fundamental electronic structure and magnetic nature of coordination compounds in relation to their biological properties. Rational molecular design was applied in the preparation of coordination compounds of 3d transition elements containing bioactive ligands based on non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs). This strategy enabled the preparation of over 50 new coordination compounds that were structurally characterized. These complexes were studied for their i) SOD mimetic and antimicrobial activity; ii) anticancer effects; and iii) magnetic activity based on reversible switching of their magnetic states. The prepared complexes were spectroscopically characterized, and the study of electron densities contributed to explaining their biological and magnetic activity. Research into the biological activity of the complexes involved studying their abilities to quench free radicals as well as their SOD mimetic activity. The interaction of transition metal complexes with DNA was studied using viscosity measurements and absorption titrations. Magnetic studies focused on identifying magnetic bistability based on single-molecule magnetism or the spin-crossover effect. Quantum mechanical calculations (DFT, ab initio) were complementarily used to explain the fundamental magnetic properties. The proposed transition metal complexes with NSAID ligands have great application potential in the development of high-capacity memory storage devices, in display construction, as contrast agents in MRI, or in medicine as drugs.