

Názov odboru: Chémia / Chemistry
Názov študijného programu: Anorganická chémia / Inorganic Chemistry
Názov dizertačnej práce: **Vplyv sekundárnej koordinačnej sféry na štruktúru a magnetické vlastnosti komplexov Ni(II) a Co(II)**
Influence of the secondary coordination sphere on the structure and magnetic properties of Ni(II) and Co(II) complexes

Meno školiteľa: prof. RNDr. Juraj Černák, DrSc.
juraj.cernak@upjs.sk
<https://www.upjs.sk/PF/zamestnanec/juraj.cernak>

Meno školiteľa-špecialistu: doc. RNDr. Juraj Kuchár, PhD.
juraj.kuchar@upjs.sk
<https://www.upjs.sk/PF/zamestnanec/juraj.kuchar>

Názov fakultného pracoviska školiteľa: Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied
Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry
<https://www.upjs.sk/prirodovedecka-fakulta/pracoviska/ustavy-pf/uchv/>

Formu realizácie DŠ: denná/daily

Anotácia témy dizertačnej práce:

Je známe, že malé zmeny zloženia a/alebo štruktúry vyskytujúce sa mimo primárnej koordinačnej sféry magneticky aktívneho centrálného atómu (napríklad zámena protiiónu alebo solvatujúcej molekuly) môžu mať významný vplyv na magnetické vlastnosti výslednej zlúčeniny [1,2]. V rámci dizertačnej práce sa budú študovať nové magneticky aktívne koordinačné zlúčeniny Ni(II) a Co(II) s homo- alebo heteroleptickou koordinačnou sférou. Stratégia syntézy bude založená na príprave vhodných koordinačných zlúčenín, v ktorých sa budú obmieňať protiióny, resp. sa pripravujú zlúčeniny s rôznymi solvatujúcimi molekulami (tzv. solvatomorfy). Pri príprave zlúčenín sa ako ligandy viazané na centrálny atóm využijú vhodné N- a O- donorové ligandy vrátane chelatujúcich ligandov, pričom okrem komerčne dostupných ligandov sa použijú aj ligandy syntetizované v rámci práce. Dôraz sa bude klásť na prípravu látok v podobe monokryštálov. Pripravené komplexné zlúčeniny sa budú štandardne charakterizovať chemickými a spektroskopickými metódami a vyriešia sa ich kryštálové štruktúry. Následne sa budú experimentálne študovať magnetické vlastnosti vybraných skupín látok a ich výsledky sa budú korelovať s výsledkami štruktúrnej analýzy.

It is known that small changes in composition and/or structure occurring outside the primary coordination sphere of the magnetically active central atom (for example, exchange of the counterion or solvate molecule) can have a significant effect on the magnetic properties of the resulting compound [1,2]. Within the planned thesis, new magnetically active Ni(II) and Co(II) coordination compounds with a homo- or heteroleptic coordination sphere will be studied. The synthetic strategy will be based on the preparation of suitable coordination compounds in which the counterions will be altered, or compounds with different solvate molecules (so-called solvatomorphs). In the preparation of these compounds, suitable N- and O-donor ligands, including chelating ones, will be used, and, in addition to commercially available ligands, also ligands synthesized itself by the doctoral student will be used. Emphasis will be given on the preparation of compounds in the form of single crystals. The prepared compounds will be characterized by standard chemical and spectroscopic methods and their crystal structures will be elucidated. Subsequently, the magnetic properties of selected groups of compounds will be experimentally studied and the results of magnetic studies will be correlated with the results of structure analyses.

1. S. Vela and H. Paulsen: Dalton Trans., 48 (2019) 1237-1245.
2. P. Garczarek, J. Janczak, M. Duczmal, J. Zon: Polyhedron, 81 (2014) 132-141. 3

Názov odboru: Chémia / Chemistry

Názov študijného programu: Anorganická chémia / Inorganic Chemistry

Názov dizertačnej práce: **Nanopórovité častice oxidu kremičitého pre cieleň transport liečiv**
Nanoporous silica particles for targeted drug delivery

Meno školiteľa: prof. RNDr. Vladimír Zeleňák, DrSc.
vladimir.zelenak@upjs.sk
<https://www.upjs.sk/PF/zamestnanec/vladimir.zelenak/>

Názov fakultného pracoviska: Katedra anorganickej chémie ÚCHV školiteľa: Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry
<https://www.upjs.sk/prirodovedecka-fakulta/pracoviska/ustavy-pf/uchv/>

Formu realizácie DŠ: Denná / Daily

Anotácia témy dizertačnej práce:

Dizertačná práca nadväzuje na niekoľkoročný výskum zameraný na vývoj nových inteligentných nosičov liečiv, uvoľňujúcich bioaktívnu látku cielene, vplyvom fyzikálneho alebo chemického stimulu. Cieľom PhD práce bude syntéza a výskum nanomateriálov na báze oxidu kremičitého, ktoré budú skúmané na dva účely. Prvým účelom je príprava a testovanie materiálov, ktoré môžu byť použité pre cieleň, vektorový transport a následné uvoľňovanie antitrombotických liečiv. Problémom antitrombotík je ich krátky polčas rozpadu a s tým potreba užívania častých dávok pacientmi. Práve takéto podávanie antitrombotík pomocou oxidu kremičitého môže viesť k predĺženiu ich polčasu rozpadu, rovnomernému podávaniu a zníženiu terapeutických dávok. Ako nosiče budú testované mezopórovité častice oxidu kremičitého (MSNs) ale aj core@shell systémy na báze MSNs, kde jadro tvoria nanočastice zlata alebo SPION. Takéto systémy umožnia cieleň podávanie a uvoľňovanie antitrombotík v reakcii na vonkajší stimul infračervené žiarenie, magnetické pole. Magnetické pole sa môže použiť na dodanie takého systému s antitrombotickým liečivom priamo do miesta trombózy.

The thesis is a follow-up to several years of research focused on the development of new intelligent drug delivery systems releasing bioactive substances in a targeted way by the influence of physical or chemical stimulus. The aim of the PhD thesis will be the synthesis and investigation of silica-based nanomaterials, which will be studied for two purposes. The first purpose is the synthesis and testing of materials that can be used for targeted, vectored transport and the subsequent release of antithrombotic drugs. The problem with antithrombotic drugs is their short half-life, thus frequent dosing is required. Such administration of antithrombotics *via* silica can lead to a prolongation of their half-life, uniform administration and reduction of therapeutic doses. As a carriers, mesoporous silica nanoparticles (MSNs) and core@shell systems based on MSNs containing gold or SPION nanoparticles, will be studied. Such systems will enable the targeted administration and release of antithrombotic drugs in response to an external stimulus. Magnetic field can be used to deliver such a system with drug directly into the thrombotic site.

Názov odboru: Chémia / Chemistry

Názov študijného programu: Anorganická chémia / Inorganic Chemistry

Názov dizertačnej práce: Pórovité koordinačné polyméry ako heterogénne katalyzátory
Porous coordination polymers as heterogeneous catalysts

Meno školiteľa: doc. RNDr. Miroslav Almási, PhD.
miroslav.almasi@upjs.sk
<https://www.upjs.sk/PF/zamestnanec/miroslav.almasi/>

Názov fakultného pracoviska: Katedra anorganickej chémie ÚCHV PF UPJŠ školiteľa: Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, UPJŠ
<https://www.upjs.sk/prirodovedecka-fakulta/pracoviska/ustavy-pf/uchv/>

Formu realizácie DŠ: denná/daily

Formu realizácie DŠ:

Anotácia témy dizertačnej práce:
Dizertačná práca nadväzuje na dlhoročný výskum v oblasti vývoja a aplikácie pórovitých koordinačných polymérov (MOF). Cieľom dizertačnej práce je príprava a postsyntetická modifikácia MOF materiálov ako katalyzátorov kondenzačných reakcií. V prvom kroku bude navrhnutý dizajn a samotná syntéza heterogénneho katalyzátora, ktorého povrch bude postsynteticky modifikovaný rôznymi funkčnými skupinami (amíny, tioly, Schiffove bázy), ktoré zvýšia katalytickú aktivitu materiálu. Následne bude študovaný priebeh vybraných kondenzačných reakcií a to sledovaním príslušných konverzií a selektívít.

The dissertation thesis builds on many years of research in the field of development and application of porous coordination polymers (MOF). The aim of the dissertation is the preparation and postsynthetic modification of MOF materials as catalysts for condensation reactions. In the first step, the design and synthesis of heterogeneous catalysts will be proposed, the surface of which will be postsynthetically modified with various functional groups (amines, thiols, Schiff bases), which will increase the catalytic activity of the material. Subsequently, the course of selected condensation reactions will be studied by monitoring the respective conversions and selectivities. 5

Názov odboru: Chémia / Chemistry

Názov študijného programu: Anorganická chémia / Inorganic Chemistry

Názov dizertačnej práce: Pórovité koordinačné polyméry ako nosiče liečiv
Porous coordination polymers as drug carriers

Meno školiteľa: doc. RNDr. Miroslav Almáši, PhD.
miroslav.almasi@upjs.sk
<https://www.upjs.sk/PF/zamestnanec/miroslav.almasi/>

Názov fakultného pracoviska: Katedra anorganickej chémie ÚCHV PF UPJŠ školiteľa: Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, UPJŠ
<https://www.upjs.sk/prirodovedecka-fakulta/pracoviska/ustavy-pf/uchv/>

Formu realizácie DŠ: denná/daily

Anotácia témy dizertačnej práce:

Cieľom dizertačnej práce je príprava stabilných a biokompatibilných MOF materiálov s nano rozmermi, ktoré budú postsynteticky modifikované aminokyselinami a polypeptidmi pre selektívne viazanie častíc k nádorovým bunkám. Pripravené kompozity budú slúžiť ako rezervoáre pre liečivá, pričom bude skúmaná ich adsorpcia ako aj desorpcia in-vitro a in-vivo na vybraných rakovinových bunkových líniiach. Taktiež bude študovaný mechanizmus prenikania materiálov cez bunkovú membránu a selektivita pripravených nosičov liečiv voči zdravým a rakovinovým bunkám.

The dissertation thesis focused on the preparation of stable and biocompatible nanosized MOF materials, which will be post-synthetically modified with amino acids and polypeptides for selective binding of particles to tumor cells. The prepared composites will serve as reservoirs for drugs, while their adsorption as well as desorption in-vitro and in-vivo on selected cancer cell lines will be investigated. The mechanism of penetration of materials through the cell membrane and the selectivity of the prepared drug carriers against healthy and cancerous cells will also be studied. 6

Názov odboru: Chémia / Chemistry

Názov študijného programu: Anorganická chémia / Inorganic Chemistry

Názov dizertačnej práce: **Koordináčny zlučeny s potenciálnym využitím v magnetickom chladení**
Coordination compounds with potential use in magnetic cooling

Meno školiteľa: doc. RNDr. Juraj Kuchár, PhD.
juraj.kuchar@upjs.sk
<https://www.upjs.sk/PF/zamestnanec/juraj.kuchar>

Názov fakultného pracoviska: Katedra anorganickej chémie ÚCHV PF UPJŠ školiteľa: Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, UPJŠ
<https://www.upjs.sk/prirodovedecka-fakulta/pracoviska/ustavy-pf/uchv/>

Formu realizácie DŠ: denná / daily

Anotácia témy dizertačnej práce:

Dizertačná práca nadväzuje na niekoľkoročný výskum zameraný na vývoj nových nízkorozmerných zlučenín na báze Cu(II) a Mn(II) s makrocyclickými ligandami pre potenciálne využitie v oblasti magnetického chladenia [1,2]. Jej motívom je navrhnuť, pripraviť a otestovať nové spôsoby viazania vyššie uvedených kovov vedúce k alternujúcim reťazcom, ktoré v základnom stave budú vykazovať ferrimagnetický stav s potenciálnym prechodom vplyvom vonkajšieho stimulu do feromagnetického usporiadania. Pre tieto účely bude práca zameraná aj na návrh a prípravu nových makrocyclických ligandov na báze 1,4,8,11-tetraazacyklotetradekán (cyclam) a 1,4,7-triazacyklononán (cyclen). Štúdium sa bude realizovať v spolupráci s Ústavom fyzikálnych vied UPJŠ a partnerskými pracoviskami v zahraničí. 7

The thesis is a follow-up to several years of research focused on the development of novel low-dimensional compounds of Cu(II) with Mn(II) and macrocyclic ligands for potential use in the field of magnetic cooling [1,2]. The motivation is to design, prepare and test new ways of binding the aforementioned metals leading to alternating chains that in the basic state will show a ferrimagnetic state with a potential transition to a ferromagnetic arrangement due to an external stimulus. For these purposes, the work will also focus on the design and preparation of new macrocyclic ligands based on 1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane (cyclam) and 1,4,7-triazacyclononane (cyclen). The study will be carried out in cooperation with the Institute of Physics of UPJŠ in Košice and other partners abroad.

1. Samoľová E., Kuchár J., Čižmár E., Dušek M.: New heterobimetallic Cu(II)/Mn(II) complexes with trans-1,8-cyclam derivatives: Synthesis, characterization, magnetic properties and crystal structures of (μ_2 -Chloro)-(dpc)-copper(II)-trichloro-manganese(II) and two polymorphs of (μ_2 -Chloro)-(dac)-copper(II)-trichloro-manganese(II). (2021) Journal of Molecular Structure, 1241, art. no. 130592. DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.130592
2. Samoľová E., Kuchár J., Grzimek V., Kliuikov A., Čižmár E.: Synthesis, crystal structure and magnetic properties of the new Cu(II)/Mn(II) coordination polymer $\{[Cu(cyclam)MnCl_3(H_2O)_2]Cl\}_n$. (2019) Polyhedron, 170, pp. 51 - 59. DOI: 10.1016/j.poly.2019.05.024

Názov odboru: Chémia / Chemistry

Názov študijného programu: Anorganická chémia / Inorganic chemistry

Názov dizertačnej práce: Koordinačné zlúčeniny s potenciálom pre terapeutické aplikácie
Coordination compounds with potential for therapeutic applications

Meno školiteľa: doc. RNDr. Zuzana Vargová, Ph.D.
zuzana.vargova@upjs.sk
<https://www.upjs.sk/PF/zamestnanec/zuzana.vargova>

Názov fakultného pracoviska: Katedra anorganickej chémie ÚCHV PF UPJŠ školiteľa: Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, UPJŠ
<https://www.upjs.sk/prirodovedecka-fakulta/pracoviska/ustavy-pf/uchv/>

Formu realizácie DŠ: denná/daily

Anotácia témy dizertačnej práce:

Dizertačná práca je zameraná na sledovanie podmienok prípravy koordinačných zlúčenín prevažne prechodných iónov kovov s N- a/alebo O-donorovými ligandami a na ich samotnú prípravu s cieľom získania látok s očakávaným antimikrobiálnym účinkom. Roztokové štúdie sa budú realizovať potenciometrickými a spektroskopickými (NMR, UV-Vis, fluorescenčnými) metódami a izolované syntetické produkty sa budú charakterizovať dostupnými technikami (IČ, UV-VIS, NMR, CHN, termická analýza, RTG štruktúrna analýza). Antimikrobiálne ako aj ďalšie biologické hodnotenia sa budú sledovať voči vybraným patologickým kmeňom mikroorganizmov a líniiam rakovinových buniek. Nadobudnuté poznatky o štruktúre, ďalších fyzikálno-chemických a biologických vlastnostiach umožnia ich vzájomnú koreláciu a následnú modifikácie pre zvýšenie účinnosti a selektivity.

The thesis is focused on observation the conditions of coordination compounds preparation predominantly based on transition metal ions with N- and/or O-donor ligands and to theirself preparation in order to obtain substances with expected antimicrobial activity. Solution studies will be performed by potentiometric and spectroscopic (NMR, UV-Vis, fluorescence) methods and isolated synthetic products will be characterized by available techniques (IR, UV-VIS, NMR, CHN, thermal analysis, X-ray structural analysis). Further biological evaluations will be performed against selected pathological strains of microorganisms and cancer cell lines, and the acquired knowledge about the structure, other physicochemical and biological properties will allow their correlation and subsequent modifications to increase efficiency and selectivity.