

# **50. Komplexkémiái Kollokvium**

**Az MKE Komplexkémiái Szakcsoportjának és  
az MTA Koordinációs Kémiai Munkabizottságának  
a rendezvénye**

**2016. május 30.-június 1., Balatonvilágos**



# **Részletes program**



12.00 – 13.30 *Ebéd*

13.35 – 13.50 Megnyitó

**Elnök: Jancsó Attila** (SzTE)

13.50 – 14.10 **E1** Tircsó Gyula, Nagy Viktória, Garda Zoltán, Kálmán Ferenc Krisztián, Mark Woods, Martín Regueiro-Figueroa, David Esteban-Gómez, Tóth Éva, Carlos Platas-Iglesias, Tóth Imre (DE): **Inert nyíltláncú és makrociklusos Ln(III)-komplexek előállítása: kis szerkezeti változtatásokkal a biztonságosabb orvosi diagnosztikáért**

14.10 – 14.30 **E2** Póta Kristóf, Quyen N. Do, Kovács Zoltán, Jakab Tóth Éva, Tircsó Gyula (DE): **A makrociklusban piridincsoportot tartalmazó, merevvázú PCTMA ligandum komplexképző sajátságainak vizsgálata**

14.30 – 14.50 **E3** Garda Zoltán, Kálmán Ferenc Krisztián, Lóczi Szilvia, Fodor Tamás, Nagy Viktória, Póta Kristóf, Quyen N. Do, Kovács Zoltán, Tóth Éva, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **1,4-helyettesített ciklén-származékok Mn(II)-komplexeinek fizikai-kémiai tulajdonságai: egyensúly, relaxometria és bomláskinetika**

14.50 – 15.10 **E4** Dancs Ágnes, Katalin Selmeczi, Gajda Tamás (SzTE): **Két hisztidintartalmú tripodális peptid összehasonlítása: egyensúly, szerkezet, pirokatechin oxidáz aktivitás**

15.10 – 15.30 **E5** Matyuska Ferenc, Nagy Nóra V., Szorcsik Attila, Szilágyi Róbert K., Gajda Tamás (SzTE): **Piridin-szubsztituensek számának és a nitrogén helyzetének hatása tripodális ligandumok komplexképzésére**

15.30 – 15.50 **E6** Szunyog Györgyi, Várnagy Katalin (DE): **Cisztein tartalmú peptidok ólom(II)komplexeinek potenciometriás és spektroszkópiás vizsgálata**

15.50 – 16.10 **E7** Erdei Judit, Várnagy Katalin (DE): **Az aszparaginsav hatása a multihisztidin tetrapeptidek komplexképző sajátságaira**

16.10 – 16.40 *Kávészünet*

**Elnök: Enyedy Éva Anna** (SzTE)

16.40 – 17.00 **E8** Szávuly Miklós István, Kaizer József, Speier Gábor (PE): **Peroxo divas(III) intermedierek reaktivitásának vizsgálata OAT és HAT reakciókban**

17.00 – 17.20 **E9** Lakk-Bogáth Dóra, Csonka Róbert, Speier Gábor, Kaizer József (PE): **Királis ligandumokból képzett oxovas(IV) komplexek reaktivitásának vizsgálata**

17.20 – 17.40 **E10** Lorencz Noémi, Csonka Róbert, Kaizer József, Speier Gábor (PE): **N-dezalkilezési reakciók vizsgálata oxovas(IV) komplexekkel**

17.40 – 18.00 **E11** Kelemen Zsolt, Buzsáki Dániel, Dietrich Gudat, Rudolf Pietschnig, Nyulászi László (BME): **Ferrocén alapú hipovalens vegyületek**

18.00 – 18.20 **E12** Kozsup Máté, Nagy Imre, Kacsir István, Szilágyi Edina, Farkas Etelka, Buglyó Péter (DE): **Potenciálisan hipoxia-aktivált Co(III) komplexek előállítása és vizsgálata**

18.20 – 18.40 **E13** Dudás Csilla, Böszörményi Éva, Kutus Bence, Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **Az izoszacharinát ion sav-bázis és kalcium-komplekképző sajátságai semleges és lúgos oldatokban**

18.40 – 19.00 **E14** Kutus Bence, Ozsvár Dániel, Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **Glükózszármazékok semleges közegben képződő kalciumkomplexeinek egyensúlyi jellemzése**

19.00 – *Vacsora*

05.30. hétfő

05.30. hétfő

05.30. hétfő

05.30. hétfő

05.30. hétfő

05.30. hétfő

05.30. hétfő

05.31. kedd

7.00 – 8.15 *Reggeli*

**Elnök: Szigyártó Imola Csilla (MTA TTK)**

8.30 – 8.50 **E15** Molnár Enikő, Kálmán Ferenc K., Tóth Éva, Tircsó Gyula (DE): **A PhDTPA ligandum előállítás és esszenciális fém- ill. ritkaföldfém(III)-ionokkal képződő komplexei egyensúlyi és kinetikai vizsgálata**

8.50 – 9.10 **E16** Farkas Edit, Baranyai Zsolt, Johannes Nagel, Tóth Imre, Frank Rösch (DE): **Ga(DATA<sup>m</sup>) mint lehetséges PET farmakon egyensúlyi, kinetikai és szerkezeti vizsgálata**

9.10 – 9.30 **E17** Vágner Adrienn, Lorenzo Tei, Tóth Imre, Brücher Ernő, Silvio Aime, Baranyai Zsolt (DE): **A két belsőszférás vízmolekulát tartalmazó Gd(CyAAZTA)(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> komplex fizikai-kémiai sajátosságainak vizsgálata**

9.30 – 9.50 **E18** Varga Norbert, Kutus Bence, Peintler Gábor, Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **Neodímium-glükonát komplexek oldategyensúlyi és -szerkezeti jellemzése**

9.50 – 10.10 **E19** Kerekes Péter, Kiss Virág, Ősz Katalin, Lente Gábor, Fábián István (DE): **A Ce(IV) és víz közötti fotokatalizált reakció kvantitatív kinetikai leírása**

10.10 – 10.30 **E20** Kiss Melitta Patricia, Valicsek Zsolt, Horváth Ottó (PE): **Korai lantanoida-porfirin komplexek szerkezetének és képződésének érdekességei**

10.30 – 11.00 *Kávészünet*

**Elnök: Buglyó Péter (DE)**

11.00 – 11.20 **E21** Szalontai Gábor, Párkányi László, Besenyei Gábor (PE): **Egy flexibilis PNP ligandum Ag(I)-komplexeinek folyadékfázisú NMR vizsgálata. Esettanulmány.**

11.20 – 11.40 **E22** Mesterházy Edit, Jancsó Attila, Colette Lebrun, Tömösi Ferenc, Pascale Delangle (SzTE): **A Wilson betegség kezelésére potenciálisan alkalmas Cu(I) kelátorok**

11.40 – 12.00 **E23** Enyedy Éva Anna, Dömötör Orsolya, Mészáros János P., Carmen M. Hackl, Wolfgang Kandioller, Bernhard K. Keppler (SzTE): **Rákellenes Rh(III)(η<sup>5</sup>-C<sub>5</sub>Me<sub>5</sub>)-komplexek összehasonlító oldategyensúlyi vizsgálata**

12.00 – 12.20 **E24** Nyulászi László, Szieberth Dénes, Joachim W. Heinicke, John Protasiewicz (BME): **Inverz polaritású P=C kötéseket tartalmazó molekulák komplexei**

12.20 – 12.40 **E25** Udvardy Antal, Szolnoki Csenge Tamara, Joó Ferenc, Kathó Ágnes (DE): **Foszfaurotropin módosítása vizes vagy oldószermentes közegben**

12.40 – 13.00 **E26** Valicsek Zsolt, Sebestyén Arnold Károly, Németh Bálint, Harrach Gergely, Horváth Ottó (PE): **Az ionerősség és az axiális ligandum hatása a vízdoldható ezüst-porfirin komplexek képződésére és oligomerizációjára**

13.00 – 14.30 *Ebéd*

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

## Koordinációs Kémiai Munkabizottság ülése

Elnök: Farkas Etelka (DE)

14.30 – 14.55 Sóvágó Imre (DE): **Alkalmask-e a peptid-komplexek metalloproteinek jellemzésére? A prionfragmensek komplexképződési folyamatai**  
**E27**

14.55 – 15.30 Penke Botond, Datki Zsolt, Fülöp Livia (SzTE): **Fémionok szerepe az Alzheimer-kór kialakulásában**  
**E28**

15.30 – 15.55 Jakusch Tamás, Kiss Tamás (SzTE): **Alzheimer-kór, béta-amiloid és komplexképzők**  
**E29**

15.55 – 16.20 Mező Gábor, Enyedi Kata Nóra, Trencsényi György, Kertész István (MTA-ELTE): **NGR peptid – Gd-kelát konjugátumok előállítása és alkalmazásuk hatékony tumordiagnosztikára**  
**E30**

16.20 – 16.50 *Kávészünet*

16.50 – 17.10 Bombicz Petra (MTA TTK): **Az egykristály röntgendiffrakció alkalmazása a komplexek szerkezetkutatásában**  
**E31**

17.10 – 17.30 May Nóra (MTA TTK): **Réz(II)komplexek szerkezetvizsgálata elektronspin rezonancia spektroszkópia és egykristály röntgendiffrakció együttes alkalmazásával**  
**E32**

17.70 – 17.50 Lente Gábor (DE): **Hétköznapi vaskomplexek – különleges reakcióik**  
**E33**

17.50 – 18.15 Horváth Ottó, Fodor Melinda Anna, Major Máté Miklós, Valicsek Zsolt, Muhammad Imran, Kiss Melitta Patrícia, Fodor Lajos, Günter Grampp, Alexander Wankmüller (PE): **Látható fény hasznosítása vízdoldható metallo-porfirinekkal**  
**E34**

18.30 – *Vacsora*

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

05.31. kedd

06.01. szerda

7.00 – 8.15 *Reggeli*

**Elnök: Kaizer József (PE)**

8.30 – 8.50 Fodor Tamás, Ayass W. W., Zékány László, Bodor Andrea, Kortz U., Tóth Imre (DE): **Dimer vagy monomer? <sup>203/205</sup>Tl NMR homo- és heteronukleáris spin-spin csatolások heteropolimetallátok oldataiban**

**E35**

06.01. szerda

8.50 – 9.10 Papp Gábor, Ölveti Gábor, Horváth Henrietta, Kathó Ágnes, Joó Ferenc (DE): **Mi köze a hangyának (*formica rufa*) a mágneses képalkotáshoz? – a *cisz,mer-[IrH<sub>2</sub>Cl(mtpms)<sub>3</sub>]* komplex katalitikus tulajdonságai vizes oldatokban**

**E36**

9.10 – 9.30 Szekeres Levente István, Jancsó Attila, Gyurcsik Béla, Kiss Tamás, Kele Zoltán (SzTE): **Új eredmények az arzénessav-tiolát kölcsönhatásban**

**E37**

9.30 – 9.50 Bolyog-Nagy Evelin, Udvardy Antal, Barczáné Bertók Ágnes, Joó Ferenc, Kathó Ágnes (DE): **Allil-alkoholok redox izomerizációja foszfa-urotropint tartalmazó félszendvics Ru(II)-katalizátorokkal**

**E38**

06.01. szerda

9.50 – 10.10 Forgács Viktória, Horváth Henrietta, Papp Gábor, Kathó Ágnes, Joó Ferenc (DE): **Deuterálás, éter- és észterképzés [Ru(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>]<sup>2+</sup> katalizátorral**

**E39**

10.10 – 10.30 Horváth Henrietta, Papp Gábor, Kovács Henrietta, Kathó Ágnes, Joó Ferenc (DE): **Hidrogén akkumulátor-hidrogén tárolása Ir-NHC-foszfin komplexekkel vizes közegben**

**E40**

06.01. szerda

10.30 – 11.00 *Kávészünet*

**Elnök: Kalmár József (DE)**

11.00 – 11.20 Csire Gizella, Kállay Csilla, Nagy Lajos, Várnagy Katalin, Sóvágó Imre (DE): **A humán prion fehérje 103-112 fragmentum és a Cu(II)-ion közötti kölcsönhatás vizsgálata – koordináció és oxidáció**

**E41**

06.01. szerda

11.20 – 11.40 Csonka Róbert, Kaizer József, Speier Gábor (PE): **Királis N-donor ligandumot tartalmazó réz-, és mangánkomplexek vizsgálata**

**E42**

11.40 – 12.00 Gyurcsik Béla, Németh Eszter, Czene Anikó (SzTE): **Cinkujj-alapú mesterséges metallonukleázok szabályozásának lehetőségei**

**E43**

12.00 – 12.20 Fábián Zita, Németh Eszter, Gyurcsik Béla (SzTE): **Cinkujj-alapú mesterséges metallonukleázok funkcionális szerkezete**

**E44**

06.01. szerda

12.20 – 12.40 Parajdi-Losonczy Péter László, Bényei Attila, Godó Attila, Mikó Diána, Horváth Anita, Farkas Etelka, Brian Duff, Denise A. Egan, Buglyó Péter (DE): **Félszendvics szerkezetű platinafémionok kölcsönhatása primer és szekunder monohidroxámsavakkal**

**E45**

12.40 – 13.00 Líhi Norbert, Raics Mária, Daniele Sanna, Várnagy Katalin, Sóvágó Imre (DE): **A cisztein hatása hisztidint is tartalmazó peptidok átmenetifém komplexekben**

**E46**

06.01. szerda

13.00 – *Ebéd*



# **Előadás-összefoglalók**



## Inert nyíltláncú és makrociklusos Ln(III)-komplexek előállítása: kis szerkezeti változtatásokkal a biztonságosabb orvosi diagnosztikáért

*Tircsó Gyula<sup>a</sup>, Nagy Viktória<sup>a</sup>, Garda Zoltán<sup>a</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>a,b</sup>, Mark Woods<sup>c,d</sup>,  
Martín Regueiro-Figueroa<sup>e</sup>, David Esteban-Gómez<sup>e</sup>, Tóth Éva<sup>b</sup>, Carlos Platas-Iglesias<sup>e</sup>,  
Tóth Imre<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék,

<sup>b</sup> Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS,

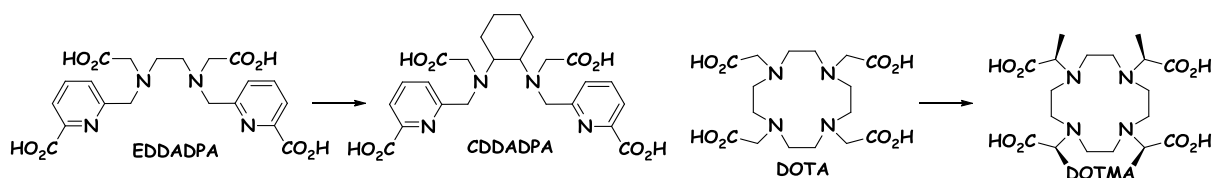
<sup>c</sup> Department of Chemistry, Portland State University,

<sup>d</sup> Advanced Imaging Research Center, Oregon Health & Science University,

<sup>e</sup> Departamento de Química Fundamental, Universidade da Coruña

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

A mágneses rezonanciás képalkotás (MRI) a kép kontrasztosságának a javítására paramágneses fémionok (elsősorban  $Gd^{3+}$ -ionok) komplexeit használja. Ezek iránt a bizalom először a 2000-es évek elején a csökkent vesefunkciójú betegeket érintő betegség, a Nefrogén Szisztémás Fibrózis (NSF), miatt rendült meg komolyan. A legújabb eredmények ráadásul azt mutatják, hogy egészséges vesefunkciójú páciensek esetében is történhetett  $Gd^{3+}$ -visszamaradás/felhalmozódás, amennyiben a betegek többszöri kontrasztanyag MR vizsgálaton estek át. Ezért a kimagaslóan inert  $Gd^{3+}$ -komplexek kutatása újabb lendületet vett. A kutatócsoportunkban már régóta keressük azokat a ligandum „szerkezeti elemeket”, amelyek lehetővé teszik a képződő komplexek inertségének hangolását/javítását. Az előadás során két olyan „fogást” mutatunk be (a ligandum gerincének a merevítésére (CDDADPA → EDDADPA), ill. az oldalláncokon sztérikus hatás kifejtése alkalmas csoportok alkalmazása (DOTA → DOTMA)), amelyeket az utóbbi időben sikeresen alkalmaztunk a  $Gd^{3+}$ -komplexek inertségének javítására.<sup>[1]</sup>



[1] a). S. Aime, M. Botta, Z. Garda, B. E. Kucera, Gy. Tircsó, V. G. Young, M. Woods, *Inorg. Chem.*, **2011**, 50(17), 7955. b). Gy. Tircsó, M. Regueiro-Figueroa, V. Nagy, Z. Garda, T. Garai, F. K. Kálmán, D. Esteban-Gómez, É. Tóth, C. Platas-Iglesias, *Chem. Eur. J.*, **2016**, 22(3), 896.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatást az OTKA K-84291 és K-109029 pályázatok támogatták.

## A makrociklusban piridincsoportot tartalmazó, merevvázú PCTMA ligandum komplexképző sajátosságainak vizsgálata

*Póta Kristóf<sup>a</sup>, Quyen N. Do<sup>b</sup>, Kovács Zoltán<sup>c</sup>, Jakab Tóth Éva<sup>d</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>*

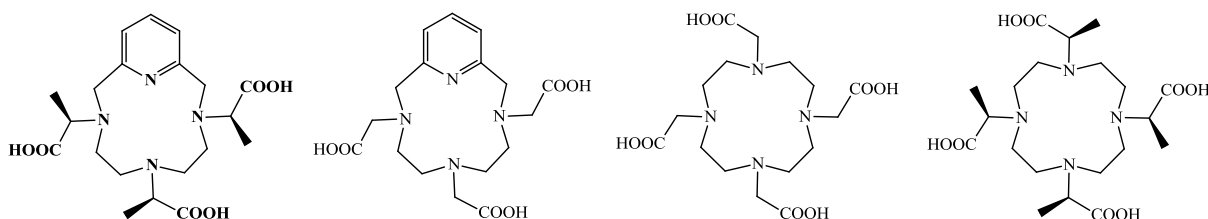
<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen, Magyarország

<sup>b</sup> Department of Radiology, <sup>c</sup> Advanced Imaging Research Center, University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA

<sup>d</sup> Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS, Orléans, France

e-mail: potakristof1992@gmail.com

A gyakorlatban alkalmazott  $Gd^{3+}$ -alapú MRI kontrasztanyagokban oktatentát ligandumok koordinálják a központi fémiont a toxikus hatás csökkentése érdekében, míg a megfelelő relaxációs hatást a fémionhoz kötődő vízmolekulának a gyors cseréje eredményezi. A ligandum donoratomszámának csökkentésével korábban már sok kutatócsoport próbálkozott, ami nagy relaxivitással rendelkező komplexeket eredményezett a kinetikai inertség rovására.[1] Az oldalláncok  $\alpha$ -szénatomján metilcsoportot tartalmazó komplexképzők esetében a kelátok inertségének javulását figyeltük meg (DOTA $\rightarrow$ DOTMA), ami a PCTMA komplexképzőt eredményezte.[2] A metilcsoportok hiperkonjugatív elektronküldő hatásának köszönhetően a ligandum bázicitása és a  $Gd^{3+}$ -komplex stabilitása is kismértékben növekedett a PCTA „anyavegyület” esetében tapasztalt állandóhoz képest ( $\log K_{GdL} = 20,68$ ). Ennél jelentősebb eredmény az, hogy a komplex bomlásának a fiziológias pH-ra számított felezési idejét két nagyságrenddel nagyobbak találtuk ( $3,4 \times 10^8$  h), mint a  $[Gd(PCTA)]$ -komplexé ( $4,5 \times 10^6$  h), amely már megközelíti a  $[Gd(DOTA)]^-$ -ra publikált értéket ( $2,7 \times 10^9$  h), mindeközben a kelát relaxivitása felülmúlja az összes klinikumban alkalmazott kontrasztanyag relaxivitását ( $r_{1p} = 8,53 \text{ mM}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ).



1. ábra A  $H_3PCTMA$ , a  $H_3PCTA$ , a  $H_4DOTA$  és a  $H_4DOTMA$  ligandumok szerkezete.

[1] S. Aime et al., *Magn. Reson. Chem.*, **1998**, 36, S200.

[2] S. Aime et al., *Inorg. Chem.*, **2011**, 50(17), 7955.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az NTP-EFÖ-P-15-0363-A, NTP-HHTDK-15-0047 és OTKA K-84291 pályázatok támogatásával valósult meg.

## 1,4-helyettesített ciklén-származékok Mn(II)-komplexeinek fizikai-kémiai tulajdonságai: egyensúly, relaxometria és bomláskinetika

*Garda Zoltán<sup>a</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>a</sup>, Lóczi Szilvia<sup>a</sup>, Fodor Tamás<sup>a</sup>, Nagy Viktória<sup>a</sup>, Póta Kristóf<sup>a</sup>, Quyen N. Do<sup>b</sup>, Kovács Zoltán<sup>c</sup>, Tóth Éva<sup>d</sup>, Tóth Imre<sup>a</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>*

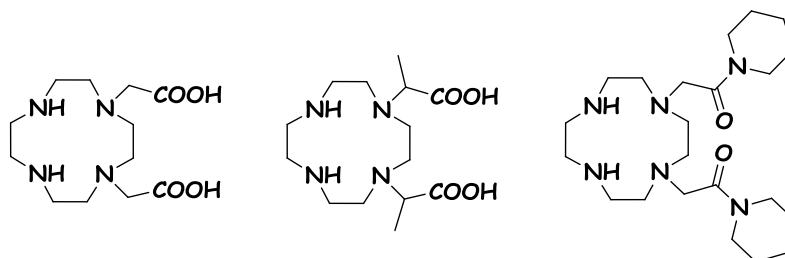
<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, <sup>b</sup> Department of Radiology,

<sup>c</sup> Advanced Imaging Research Center, University of Texas Southwestern Medical Center,

<sup>d</sup> Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS

e-mail: garda.zoltan@science.unideb.hu

A jelenleg alkalmazott ( $Gd^{3+}$ -alapú) Mágneses Rezonanciás Képképzés (MRI) kontrasztanyagokkal ellentétben a  $Mn^{2+}$ -ionra épülő ágensek számos előnnyel kecsegtetnek, mivel a felhasználásuk kisebb egészségügyi kockázattal, mérsékelt költségekkel és kisebb környezeti hatással jár. Annak ellenére, hogy az utóbbi időben intenzív kutatások folynak  $Mn^{2+}$ -alapú kontrasztanyagok kifejlesztésére, egy minden kritériumnak (jó termodinamikai és redoxi-stabilitás, nagy inertség és relaxivitás) megfelelő vegyületet a mai napig nem sikerült találni. A korábbi vizsgálataink alapján az 1,4-helyettesített ciklén-származékok (*cisz*-DO2A)<sup>[1]</sup> jó kiindulási pontot jelentenek a fejlesztésekhez, de a  $Mn^{2+}$ -komplex inertségét tovább kell hangolni. Erre az oldalláncok módosításával látunk lehetőséget, így került látószögünkbe az oldalláncok alfa-szénatomján metilcsoportot tartalmazó *cisz*-DO2MA, ill. az acetátcsoportok tercier amidcsoportokkal történő helyettesítésével levezethető *cisz*-DO2AM<sup>Pip</sup> komplexképző (1. ábra). Az előadásban ezen ligandumok és  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$  és  $Mn^{2+}$ -ionokkal alkotott komplexeinek oldategyensúlyi, valamint a  $Mn^{2+}$ -komplexeik bomláskinetikai és relaxometriás vizsgálatainak az eredményeit fogjuk bemutatni.



1. ábra. A *cisz*-DO2A, *cisz*-DO2MA és a *cisz*-DO2AM<sup>Pip</sup> ligandumok szerkezeti képletei

[1] Z. Garda, A. Forgács, Q. N. Do, F. K. Kálmán, S. Timári, Zs. Baranyai, L. Tei, I. Tóth, Z. Kovács and G. Tircsó, *J. Inorg. Biochem.*, **2016**, beküldve.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA K-84291 és K-109029 pályázatok támogatásával valósult meg.

## Két hisztidintartalmú tripodális peptid összehasonlítása: egyensúly, szerkezet, pirokatechin oxidáz aktivitás

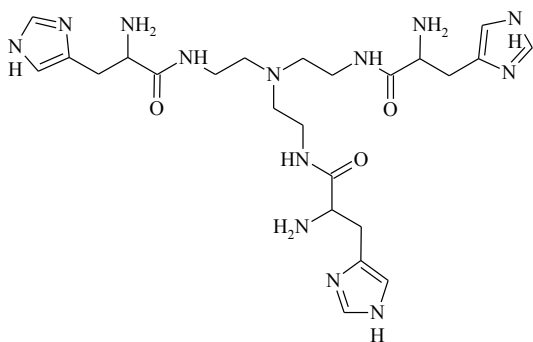
*Dancs Ágnes<sup>a</sup>, Katalin Selmeczi<sup>b</sup>, Gajda Tamás<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

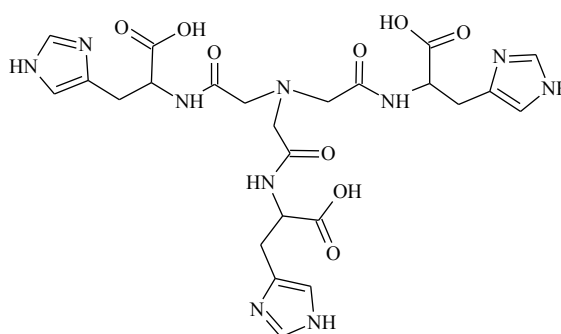
<sup>b</sup> Laboratoire SRSMC UMR 7565, Université de Lorraine (Nancy, France)

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

A tripodális ligandumok a bioszervetlen kémia széles körben vizsgált vegyületei, hiszen preorganizált szerkezetük a metalloenzimek aktív centrumához teszi hasonlatossá fémkomplexeiket. Ugyanakkor, néhány egyszerű tripodális platform (nitrilotriecetsav (nta), trisz(2-aminoetil)amin (tren)) megfelelő funkcionalizálása révén néhány további funkció (pl. nagyobb fémion affinitás, szubsztrát kötőhely, további fémkötőhely) kiépítése is lehetővé válik, ami hatékonyabb enzimutánzó sajátságot eredményezhet.



*trenHis<sub>3</sub>*



*ntaHis<sub>3</sub>*

Kutatócsoportunk az elmúlt években – többek között – peptid típusú tripodális ligandumok fémionokkal alkotott komplexeit vizsgálta. Jelen előadásban két hisztidintartalmú tripodális peptid (*trenHis<sub>3</sub>*, *ntaHis<sub>3</sub>*) cink(II) komplexeinek vizsgálata mellett, a korábban már bemutatott réz(II)komplexek pirokatechin oxidáz és szuperoxid dizmutáz aktivitásáról számolunk be.

## Piridin-szubsztituensek számának és a nitrogén helyzetének hatása tripodális ligandumok komplexképzésére

*Matyuska Ferenc<sup>a</sup>, Nagy Nóra V.<sup>b</sup>, Szorcsik Attila<sup>c</sup>, Szilágyi Róbert K.<sup>d</sup>, Gajda Tamás<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem

<sup>b</sup> Kristallográfiai Kutatócsoport, MTA TTK

<sup>c</sup> MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport

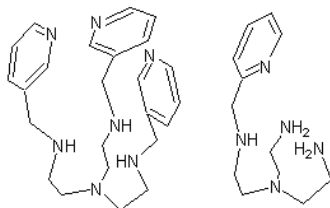
<sup>d</sup> Szervetlen Kémiai Tanszék, University of Montana

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

A tripodális ligandumok komplexeinek stabilitása általában nagyobb más ligandumokkal szemben, hála a csatolt keláteffektusnak és a potenciális kötésmódok csökkent számának. A TREN(trisz-2-aminoetilamin)-alapú tripodális ligandumokat széles körben használják biomimetikus katalizátorok és fémion-szenzorok kifejlesztésére. Az N,N',N''-tris[N-(2-piridilmetil)-2-aminoetil]amin (2'-TPAA) mangán(II)- és vas(II)-komplexei hatékony SOD-utánzó anyagok, bár a komplexeiben a fémion környezete telített, és ez gátolja a szubsztrátok hozzáférését a fémcentrumhoz. Ezen hiányosság kiküszöbölésére és a ligandum hatékonyságának növelésére két módszert választottunk: (i) csökkenteni a funkcionális lábak számát és (ii) megváltoztatni a gyűrűben levő nitrogének helyzetét, ezáltal elérve a telítetlen koordinációs szférát. Így két ligandumot szintetizáltunk, az N,N',N''-tris[N-(3-piridilmetil)-2-aminoetil]amint (3'-TPAA, **L**<sup>1</sup>) és az N-[N-(2-piridilmetil)]-(tris(2-aminoetil)amin)-t (2'-MPAA, **L**<sup>2</sup>). Előbbi ligandum lehetőséget biztosíthat arra is, hogy oligonukleáris komplexek képződjenek

Az **L**<sup>1</sup> ligandum egymagvú komplexeket képez, amik zömmel kompakt trigonális bipiramisos geometriával bírnak. Semleges pH-n a fő részecskékben a fémionnak egy könnyen hozzáférhető koordinációs helye van. Habár vízoldható oligomerek képződését nem tapasztaltuk, réz(II) jelenlétében szilárd fázisban 2:1 fém/ligandum arányú 3D polimer (MOF = metal-organic-framework) képződik.

Az **L**<sup>2</sup> jelenlétében igen stabil egymagvú komplexek képződnek a 3d fémionokkal. Ezen komplexeket vizes közegben pH-potenciometria, UV-Vis spektrofotometria, ESR és NMR-spektroszkópiák valamint ciklikus voltammetria segítségével karakterizáltuk. A ligandum vas(III)-komplexeit csak szerves oldószerekben sikerült kimutatnunk (DMF, MeCN, EtOH). DMF-ben és MeCN-ben a fémion és a ligandum között redoxreakció játszódik le vas(II)-imino komplex képződése közben. EtOH-ban a **FeL**<sup>2</sup> stabil volt.



**1. ábra:** A ligandumok sematikus ábrái (**L**<sup>1</sup> balra, **L**<sup>2</sup> jobbra)

Szeretnénk megköszönni az OTKA (K101541) anyagi támogatását.

### Ciszteín tartalmú peptidek ólom(II)komplexeinek potenciometriás és spektroszkópiás vizsgálata

*Szunyog Györgyi, Várnagy Katalin*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: szunyog.gyorgyi@science.unideb.hu

A környezetünkbe kikerülő ólom kémiai tulajdonságai alapján könnyen kötődhet olyan fehérjékhez, amelyek létfontosságú fémiont (cink, kalcium stb.) tartalmaznak, és így töltik be az adott biokémiai funkciót. Ha ezen fémionok helyére a lágyabb karakterű toxikus fémionok lépnek be, irreverzibilis kölcsönhatásokat alakíthatnak ki, megváltoztatva, illetve megakadályozva a fémiontartalmú fehérje működését. Ez hatással lehet a csontokra, a vesékre, kifejtethet karcinogén hatást, és az agyba kerülve a neurodegeneratív betegségek kialakulásában közvetve szerepet játszhat. A toxikus fémionok eltávolítására, megkötésére így alkalmasak lehetnek olyan – elsősorban kéndonoratómot tartalmazó – peptidek, amelyek szelektíven képesek kötni a fent említett fémiont.

Munkám során az volt a cél, hogy olyan peptideket állítsak elő, amelyek nagy stabilitással képesek kötni az ólom(II)iont. Az eddigi vizsgálatok egyértelműen mutatják, hogy a legjobb kötőhely a fémionok számára a ciszteín oldalláncbeli tiolátcsoport, és a stabilitást befolyásolja a ciszteinek száma, helyzete és a terminális aminocsoport jelenléte.

Ennek vizsgálatára két – nem védett – két ciszteint tartalmazó (CSSACS-NH<sub>2</sub>, ACSSACS-NH<sub>2</sub>) peptidet szintetizáltunk és elvégeztük azok Pb(II)-komplexeinek oldategyensúlyi jellemzését.

A két ligandumot több fémion-ligandum aránnyal vizsgálva megállapítottuk, hogy a Pb(II) elősegíti a tiolcsoportok deprotonálódását, nagystabilitású monokomplexek képződnek, biszkomplexeiket viszont egyik ligandummal sem mutattunk ki. Mindkét esetben a ligandum háromfogú koordinációja valósul meg, mely akadályozza, hogy még egy peptid kapcsolódjon a fémionhoz. A vizsgálataimat <sup>1</sup>H-NMR spektroszkópiával, és UV-spektroszkópiával is alátámasztottam.

Stabilitási állandóikat más fémionok adataival összevetve elmondható, hogy nagy stabilitású komplexek képződnek, a stabilitási állandók értékei a Cd(II)- és a Zn(II)-ionra vonatkozó értékek között helyezkednek el.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönettel tartozom az NKFI-6, K 115480 pályázatnak az anyagi támogatásért.



## Az aszparaginsav hatása a multihisztidin tetrapeptidek komplexképző sajátságaira

*Erdei Judit, Várnagy Katalin*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: jutka.erdei@gmail.com

Az élő szervezetben jelenlévő fehérjékben főként az oldalláncban található donoratomokon keresztül kapcsolódnak az átmenetifémionok. Ezen fémion–fehérje kölcsönhatások megértésére a Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoportban folyó kutatások során különböző tagszámú és szekvenciájú peptideket vizsgálnak. Az egyik kutatási irány a különböző számban és helyzetben hisztidint tartalmazó peptidek átmenetifém-ionokkal alkotott komplexek vizsgálata [1]. Ezek a peptidek stabilis komplexeket képeznek olyan létfontosságú nyomelemekkel, mint a Cu(II), Ni(II), Zn(II), így modelljei lehetnek a Cu,Zn-SOD enzimnek. A kialakuló komplexek stabilitását a hisztidinek száma mellett az egyéb oldalláncbéli csoportok is befolyásolják.

Ezen munkába bekapcsolódva azt vizsgáltam, hogy az oldalláncbéli karboxilátcsoport hogyan befolyásolja a komplexképzési folyamatokat. Az általam vizsgált két tetrapeptid (Ac-HADH-NH<sub>2</sub> és Ac-HDAH-NH<sub>2</sub>) Cu(II)-, Ni(II)-, Zn(II)-komplexek jellemzését végeztem el.

Összességében megállapítottuk, hogy az aszparaginsav karboxilátcsoportja csak csekély hatással van a Ni(II)-komplexek képződésére, ugyanakkor jelentősen befolyásolja a komplexképződési folyamatokat mind a réz(II), mind a cink(II)-komplexek esetén. A karboxilátcsoport koordinációja növeli a [CuLH<sub>1</sub>] (L=HADH), illetve a [CuLH<sub>2</sub>] (L=HDAH) komplexek stabilitását. A cink(II)-HADH esetén pedig szintén kimutattuk az amidnitrogének deprotonálódását és koordinációját a [ZnLH<sub>1</sub>] és [ZnLH<sub>2</sub>] komplexekben.

[1] I. Sóvágó, K. Várnagy, N. Lihi, Á. Grenács, *Coord. Chem Rev.*, (2016) közlésre elfogadva

**Köszönetnyilvánítás:** A Kutatást NKFI K 116480 pályázata, valamint az NTP-HHTDK-15-0047 támogatta.

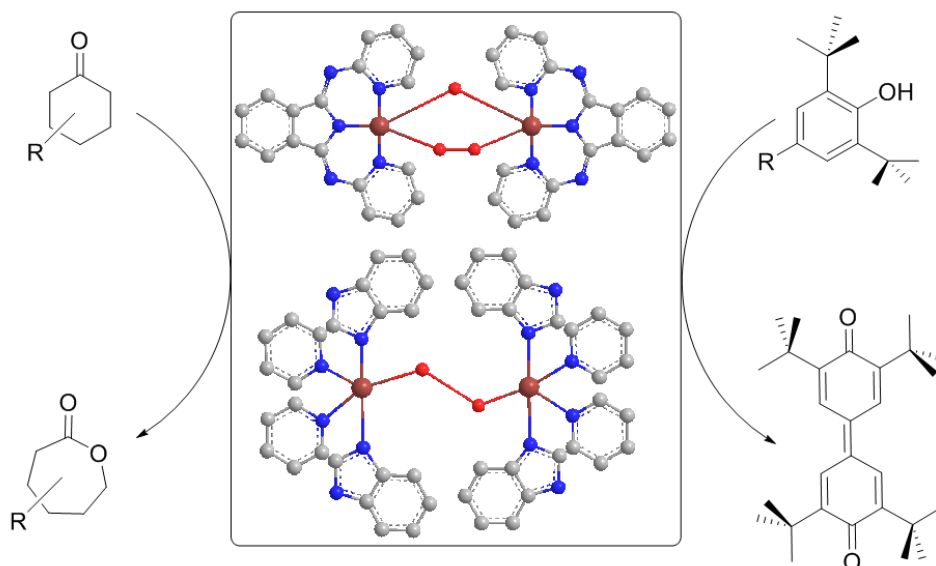
## Peroxo divas(III) intermedierek reaktivitásának vizsgálata OAT és HAT reakciókban

*Szavuly Miklós István<sup>a</sup>, Kaizer József<sup>a</sup>, Speier Gábor<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék, Veszprém

e-mail: miklos\_szavuly@yahoo.com

A nemhem-típusú divastartalmú enzimek funkciójukat tekintve igen változatos kémiai reakciókért felelősek. Ezen enzimek csoportjába sorolható a ribonukleotid reduktáz (RNR R2), az oldható metán-monooxygenáz (sMMO), a human deoxihipuzsin hidroxiláz (hDOHH), a szetaril-ACP  $\Delta^9$  deszaturáz ( $\Delta^9D$ ) és a hemeritrin (Hr), melyek reaktív peroxo- és oxo-intermediereken keresztül reagálnak a megfelelő szubsztrátummal. Kutatásainkban olyan peroxo-divas(III) komplexeket állítottunk elő melyek a fent említett enzimek szerkezeti modelljeinek tekinthetők [1,2]. Kutatásaink célja ezen, metastabilis peroxo-divas(III) intermedierek reaktivitásának vizsgálata OAT és HAT reakciókban (ábra 1), szubsztrátumokként ciklikus ketonokat illetve fenolokat választva.



Ábra 1

[1] J. S. Pap, M. A. Cranswick, É. Balogh-Hergovich, G. Baráth, M. Giorgi, G. T. Rohde, J. Kaizer, G. Speier, L. Que Jr., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2013**, 22-23, 3858-3866.

[2] J. S. Pap, A. Draksharapu, M. Giorgi, W. R. Browne, J. Kaizer, G. Speier, *Chem. Commun.*, **2014**, 50, 1326-1329.

**Köszönetnyilvánítás:** OTKA K108489.

## Királis ligandumokból képzett oxovas(IV) komplexek reaktivitásának vizsgálata

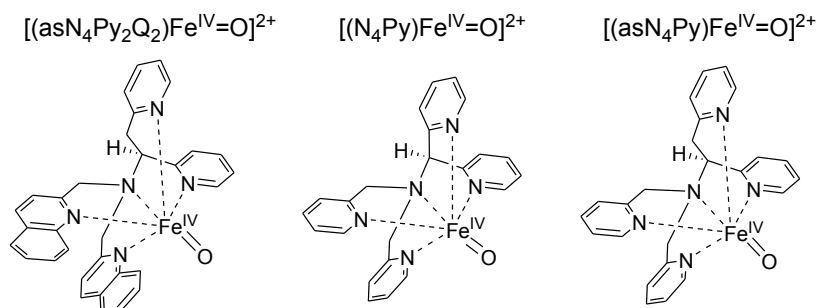
*Lakk-Bogáth Dóra, Csonka Róbert, Speier Gábor, Kaizer József*

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

e-mail: lakkd@almos.uni-pannon.hu

Az egymagvú nemhem vastartalmú enzimek oxigén aktivációs folyamataiban gyakran képződik reaktív oxovas(IV) intermedier [1]. Az elmúlt évtizedben számos nemhem oxovas(IV) komplexet állítottak elő négy-, és ötfogú ligandumokból kiindulva [2]. Nagy figyelmet kapott a nitrogénben gazdag ötfogú ligandumok koordinációs kémiája. Ezen ligandumok stabilizálják a magas vegyértékű fém központokat valamint képesek hidrogén-, és oxigén atom transzferrel (HAT, OAT) járó reakciókra [3,4]. Királis rendszerekre azonban kevés példa található az irodalomban [5].

A nemhem monovas enzimek szerkezeti modelljeként új királis ötfogú ligandumokat és vas komplexeiket állítottuk elő, amelyeket prekurzorként használtunk királis oxovas(IV) vegyületek képzéséhez. Az oxovas(IV) komplexek jellemzését és képződési kinetikáját UV-Vis spektroszkópiás, nagyfelbontású tömegspektroszkópiás és Mössbauer spektroszkópiás módszerekkel vizsgáltuk. Továbbá ezen intermedierek reaktivitását tanulmányoztuk HAT és OAT reakciókban.



**1. ábra** A reakciókban képződött reaktív oxovas(IV) intermedierek szerkezete

- [1] Costas, M.; Mehn, M. P.; Jensen, M. P.; Que, L., Jr.: *Chem. Rev.*, **2004**, *104*, 939.
- [2] McDonald, A. R.; Que, L. Jr.: *Coord. Chem. Rev.*, **2013**, *257*, 414.
- [3] Kaizer, J.; Klinker, E. J.; Oh, N. Y.; Rohde, J.-U.; Song, W. J.; Stubna, A.; Kim, J.; Münck, E.; Nam, W.; Que, L. Jr.: *J. Am. Chem. Soc.*, **2004**, *126*, 472.
- [4] Klinker, E. J.; Kaizer, J.; Brennessel, W. W.; Woodrom, N. L.; Cramer, C. J.; Que, L. Jr.: *Angew. Chem.*, **2005**, *117*, 3756.
- [5] Abouelatta I. A.; Sonk, J. A.; Hammoud M. M.; Zurcher, D. M.; McKamie, J. J.; Schlegel, B. H.; Kodanko, J. J.: *Inorg. Chem.*, **2010**, *49*, 5202.

**Köszönetnyilvánítás:** az OTKA K108489 biztosította a kutatás pénzügyi fedezetét.

***N*-dezalkilezési reakciók vizsgálata oxovas(IV) komplexekkel**

*Lorencz Noémi<sup>a</sup>, Csonka Róbert<sup>a</sup>, Kaizer József<sup>a</sup>, Speier Gábor<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Kémia Intézet, Szerves Kémiai Intézeti Tanszék  
e-mail: lorencz.noemi@gmail.com

Az enzimek egy nagyon fontos csoportját alkotják az oxidáz és oxigenáz enzimek. Széles körben megtalálhatók különböző élő szervezetekben, funkciójukat tekintve pedig fontos szerepet töltenek be a szervezetek számára mérgező anyagok, valamint esszenciális vegyületek aerob körülmények között lejátszódó lebontási folyamataiban, bioszintézisében.[1]

Az vastartalmú oxidoreduktáz enzimek fontos csoportját képezik az  $\alpha$ -ketoglutarát-függő oxidázok és oxigenázok, amelyek különböző, biológiailag fontos vegyületek hidroxilezési reakcióinak katalízisét végzik [2]. Az  $\alpha$ -ketoglutársav, mint kosubsztrátum szerepe a magas vegyértékű oxovas(IV) intermedierek kialakításában nyilvánul meg. Irodalmi adatok alapján a magas vegyértékű oxovas(IV) porfirin gyökkation katalizálja az *N*-dezalkilezési reakciókat [3].

Feladatom ennek mintájára nem-hem vas tartalmú rendszerek kidolgozása. Oxidálószerként oxovas(IV) komplexeket ( $[(\text{asN}_4\text{Py})\text{FeIV}(\text{O})]^{2+}$ ,  $[(\text{asN}_2\text{Py}_2\text{Q})\text{FeIV}(\text{O})]^{2+}$ ), szubsztrátumként pedig *para*-szubsztituált-dialkilaminokat használtam [4].

Eredményként azt kaptam, hogy a fenti komplexek jól katalizálják a dialkilaminok *N*-dezalkilezési reakcióit, termékként szekunder aminot és formaldehidet eredményezve. Részletes reakciókinetikai mérések alapján (UV-VIS) javaslatot tettem a reakció mechanizmusára.

[1] O. Hayaishi, K. Hashimoto, *J. Biochem.* (Tokyo), **9**, 371 (1950)

[2] A. G. Prescott, M. D. Lloyd, *Nat. Prod. Rep.*, **17**, 367 (2000)

[3] E. J. Klinker, J. Kaizer, W. W. Brennessel, N. L. Woodrum, C. J. Cramer, L. Que, *Angew. Chem.*, 3691 (2005)

[4] K. Nehru, M. S. Seo, J. Kim, and W. Nam, *Inorg. Chem.* **46**, 293 (2007)

**Köszönetnyilvánítás:** az OTKA K108489 biztosította a kutatás pénzügyi fedezetét

## Ferrocén alapú hipovalens vegyületek

*Kelemen Zsolt<sup>a</sup>, Buzsáki Dániel<sup>a</sup>, Dietrich Gudat<sup>b</sup>, Rudolf Pietschnig<sup>c</sup>, Nyulászi László\*<sup>a</sup>*

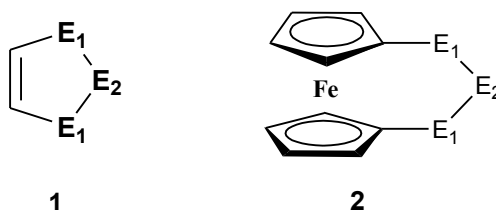
<sup>a</sup> BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék Szent Gellért tér 4. H-1111 Budapest

<sup>b</sup> Institut für Anorganische Chemie Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 55 70569 Stuttgart, Germany

<sup>c</sup> University of Kassel Heinrich-Plett-Str. 40 34132 Kassel Germany

e-mail: kelemen.zsolt@mail.bme.hu

A karbének kétvegyértékű szénatomot tartalmazó hipovalens vegyületek, melyek különleges szerkezeti sajátágaik mellett számos felhasználhatóságuk miatt váltak napjaink egyik leginkább kutatott vegyületcsaládjává. Noha a nitrogén heterociklusos karbének (**1. ábra: 1**  $E_1 = \text{NR}$ ,  $E_2 = \text{C}$ :) a leginkább vizsgált ilyen vegyületek, az utóbbi években ferrocén egységet is tartalmazó karbének is megjelentek az irodalomban (**1. ábra: 2**  $E_1 = \text{NR}$ ,  $E_2 = \text{C}$ :).[1,2]



**1. ábra:** Vizsgált vegyületek  $E_1$ : O, S, NR, PR;  $E_2$ : C, Si, PR

Két német kutatócsoporttal (Prof. Pietschnig – Kassel és Prof. Gudat – Stuttgart) való együttműködésünk során célul tűztük ki **2** típusú vegyületek (1. ábra) előállítását és tulajdonságainak vizsgálatát.[3] Kvantumkémiai számításaink megmutatták, hogy bizonyos képviselők nagy stabilitással rendelkeznek, továbbá egyedi redox tulajdonságok várhatóak köszönhetően a ferrocén egység jelenlétének. Szintetikus munkánk során megmutattuk, hogy noha  $E_1$ :PR esetében számos sztereoiszomer elképzelhető csak bizonyos izomerek keletkezését figyeltük meg, továbbá a foszforon lévő R szubsztituensek segítségével hangolható az izomerek száma.[3]

[1] U. Siemeling, C. Farber C. Bruhn *Chem. Commun.*, **2009**, 98–100; see also D. M. Khrarov, E. L.

Rosen, V. M. Lynch, C. W. Bielawski *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 2267–2270.

[2] C. Goedecke, M. Leibold, U. Siemeling, G. Frenking *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 3557–3569.

[3] D. Kargin, Z. Kelemen, K. Krekić, C. Bruhn, L. Nyulászi, R. Pietschnig, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 2180-2189

### Potenciálisan hipoxia-aktivált Co(III) komplexek előállítása és vizsgálata

*Kozsup Máté<sup>a</sup>, Nagy Imre<sup>a</sup>, Kacsir István<sup>a</sup>, Szilágyi Edina<sup>a</sup>, Bényei Attila Csaba<sup>b</sup>,*

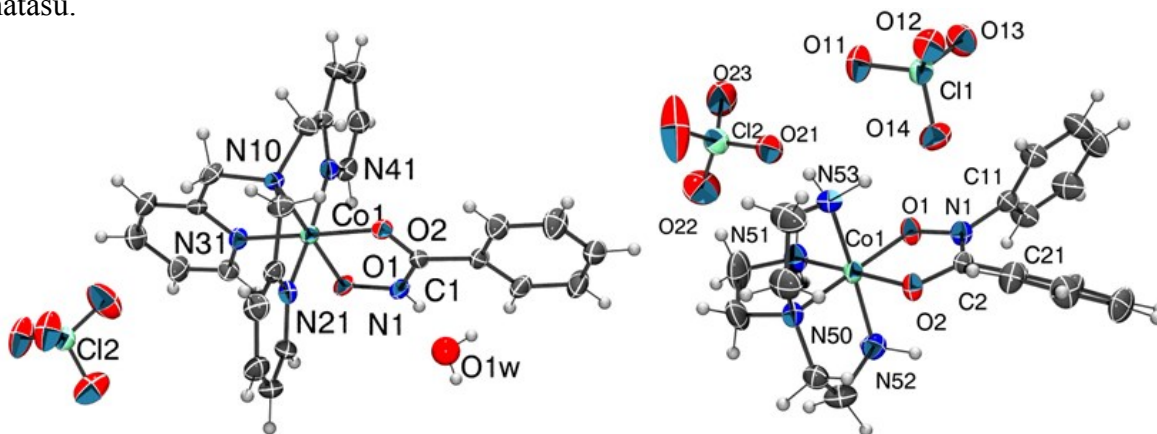
*Farkas Etelka<sup>a</sup>, Buglyó Péter<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Röntgendiffrakciós Laboratórium

e-mail: buglyo@science.unideb.hu

A rákterápiában alkalmazott Pt(II) komplexek nem megfelelően szelektívek, így használatuk során számos súlyos mellékhatás jelentkezik. A kisebb koncentrációban is aktív és szelektívebb fémiontartalmú rákellenes hatású készítmények kifejlesztéséhez a normál és rákos sejtek eltérő tulajdonságai nyújthatnak támpontot. A rákos szövetekben például oxigénhiányos állapot (hipoxia) áll fenn, ami redukтивabb környezetet jelent. Ez lehetővé teheti hordozóként használt, inert Co(III) komplexek redukcióját a hipoxiás környezetben és a labilis, kisebb stabilitású Co(II) komplexből olyan molekula felszabadulását, amely rákellenes hatású.



Munkánk során  $[\text{Co}^{\text{III}}(4\text{N})(\text{Ha})]\text{X}_n$  típusú, vegyes ligandumú komplexek előállításával és vizsgálatával foglalkoztunk. Ligandumként négyfogú tripodális aminokat ( $4\text{N} = \text{tren}, \text{tpa}, \text{abap}, \text{pmea}, \text{uns-penp}$ ), valamint hidroxámsavakat (Ha) alkalmaztunk, mely utóbbiak egyes képviselői igazoltan rákellenes hatásúak. A vegyes ligandumú komplexek ciklikus voltametriás vizsgálatával a ligandumok típusának és a hidroxamátok szubsztituenseinek, a komplexek redukciós potenciáljára gyakorolt hatását kívántuk felderíteni. Eredményeinket foglalja össze a tervezett előadás.

**Köszönetnyilvánítás:** A munka az OTKA (K112317) anyagi támogatásával készült.

## Az izoszacharinát ion sav-bázis és kalcium-kompleképző sajátságai semleges és lúgos oldatokban

*Dudás Csilla<sup>a,c</sup>, Böszörményi Éva<sup>a,c</sup>, Kutus Bence<sup>a,c</sup>, Csendes Zita<sup>c</sup>, Pálinkó István<sup>b,c</sup>,  
Sipos Pál<sup>a,c</sup>*

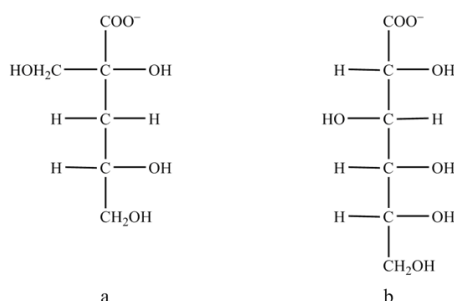
<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szerves kémiai Tanszék

<sup>c</sup> Szegedi Tudományegyetem, Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport

e-mail: [dudas.csilla@chem.u-szeged.hu](mailto:dudas.csilla@chem.u-szeged.hu)

A kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékokat betonba keverve földalatti tárolókban (pl. kimerült bányákban) helyezik el. A cement magas  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  tartalma miatt a beton pórusaiban levő vizes oldat erősen lúgos kémhatású. Ezek a körülmények szerves anyagok, mint például a cellulóz lebomlását eredményezik. A cellulóz lúgos közegű bomlásának fő terméke az  $\alpha$ -D-izoszacharinát ( $\text{ISA}^-$ ), amely egy hat szénatomos polihidroxi-karboxilát (1. a ábra).



**1. ábra** Az  $\alpha$ -D-izoszacharinát (a) és D-glükonát (b) szerkezeti képlete

Számos közleményben számoltak be az  $\text{ISA}^-$  és egyes radioaktív fémionok között lúgos közegben kialakuló nagy stabilitású komplexekről, amelyek elősegíthetik azt, hogy különböző radioaktív szennyezők a környezetbe jussanak. Mivel az  $\text{ISA}^-$  nehezen hozzáférhető és előállításuk körülményes, viselkedését sok esetben a hasonló szerkezeti elemeket tartalmazó D-glükonáttal ( $\text{Gluc}^-$ , 1. b ábra) modellezik. A  $\text{Gluc}^-$  lúgos közegben  $\text{Ca}^{2+}$  jelenlétében nagy stabilitású többmagvú,  $[\text{Ca}_2\text{Gluc}(\text{OH})_3]^0$  valamint  $[\text{Ca}_3\text{Gluc}_2(\text{OH})_4]^0$  összetételű komplexeket képez.

Munkánk során a  $\text{Ca-ISA}^-$  rendszer semleges és lúgos közegbeli viselkedését tanulmányoztuk, különös figyelmet fordítva az  $\text{ISA}^-$  és a  $\text{Gluc}^-$  közötti hasonlóságok és különbségek feltárására, hogy eldönthessük, a  $\text{Gluc}^-$  valóban megfelelő modellje-e az  $\text{ISA}^-$ -nak.

### Glükózszármazékok semleges közegben képződő kalciumkomplexeinek egyensúlyi jellemzése

*Kutus Bence<sup>a,c</sup>, Ozsvár Dániel<sup>a,c</sup>, Pálinkó István<sup>b,c</sup>, Sipos Pál<sup>a,c</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

<sup>c</sup> Szegedi Tudományegyetem, Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport

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

A fémion-szénhidrát kölcsönhatások kiemelt szerepet töltenek be az élő szervezet anyagcsere-folyamataiban, emiatt a különböző fémkomplexeket számos területen alkalmazza a gyógyszer- és élelmiszeripar; a sokrétű felhasználási lehetőség egyik kiváló példája a nátrium-D-glükonát ( $\text{Gluc}^-$ ) [1]. A közelmúltban a diasztereomer nátrium-L-gulonáttal ( $\text{Gul}^-$ ) végzett vizsgálataink kimutatták, hogy a nyilvánvaló 1:1 összetételű részecskék mellett 1:2 összetételű  $\text{Ca}^{2+}$ -komplexek is képződnek. Mivel a korábban megjelent igen nagyszámú közleményben (egy kivétellel) kizárólag az 1:1 komplex képződését tételezték fel, jelen munka célja az volt, hogy megvizsgáljuk, a D-glükóz (Glu) és származékai milyen feltételek mellett képesek  $\text{ML}_2$  összetételű komplexet képezni  $\text{Ca}^{2+}$  ionnal semleges közegben.

Méréseinket  $\text{Ca}^{2+}$ -ionszelektív elektróddal végeztük 25 °C-on 1 M ionerősség mellett; a ligandum-fémion arány a teljes kísérletsorozatra vonatkozóan 0,85 és 3000 között változott. A Glu esetén még nagy ligandumfelesleg esetén sem tapasztaltunk komplexképződést, míg a D-szorbitol (Sor) és a diasztereomer D-mannitol (Man) kis stabilitású, 1:1  $\text{Ca}^{2+}$ -komplexet képez. A  $\text{Gluc}^-$  és a hét szénatomos D-heptaglükonát ( $\text{Hpgl}^-$ ) Ca-komplexei ennél jóval stabilabbak és mindkét esetben 1:1 és 1:2 komplexek képződnek. A két ligandumra kapott stabilitási állandók a kísérleti bizonytalanságot figyelembe véve megegyeznek, ezt fagyáspontcsökkenés mérés segítségével is igazoltuk. A nagymértékű hasonlóság oka valószínűleg a hasonló térszerkezet. A  $\text{Gluc}^-$  és  $\text{Hpgl}^-$  esetén elvégzett polarimetriás mérések alapján a számottevő komplexképződés ellenére a forgatási szög csak kismértékben változik, ami bizonyíték a  $\text{Ca}^{2+}$ -ion és OH-csoport(ok) közti gyenge kölcsönhatásra.

Eddigi eredményeink alapján 1:2  $\text{Ca}^{2+}$ -komplexek képződésére elsősorban a karboxilátcsoporttal rendelkező cukor típusú ligandumok esetén van lehetőség.

[1] S. Ramachandran *et al.*, *Food. Technol. Biotech.*, **2006**, *44*, 185–195.





## **Ga(DATA<sup>m</sup>) mint lehetséges PET farmakon egyensúlyi, kinetikai és szerkezeti vizsgálata**

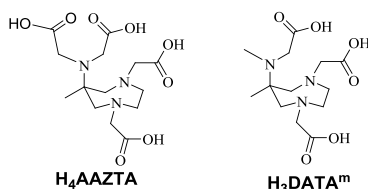
*Farkas Edit<sup>a</sup>, Baranyai Zsolt<sup>a</sup>, Johannes Nagel<sup>b</sup>, Tóth Imre<sup>a</sup>, Frank Rösch<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Johannes Gutenberg-University Mainz, Institute of Nuclear Chemistry

e-mail: farkas.edit@science.unideb.hu

Az egyik legérzékenyebb orvosi képalkotó módszer a Pozitron Emissziós Tomográfia (PET). A PET-ben jelenleg alkalmazott  $\beta^+$ -sugárzó izotópok mellett ( $^{18}\text{F}$ ,  $^{11}\text{C}$ ,  $^{15}\text{O}$  és  $^{13}\text{N}$ ) egyre jelentősebb az izotóp generátorral nyerhető fémizotópok (pl.  $^{68}\text{Ga}$ :  $^{68}\text{Ge}/^{68}\text{Ga}$ ;  $^{44}\text{Sc}$ :  $^{44}\text{Ti}/^{44}\text{Sc}$ ) felhasználása.<sup>1</sup> A  $^{68}\text{Ga}$ -cal előnyös radiokémiai sajátosságai [89%  $\beta^+$ ;  $\tau_{1/2} = 68$  perc,  $E_{\beta^+, \text{max}} = 1,89$  MeV] és olcsósága miatt intenzív kémiai és sikeres klinikai kutatások folynak.<sup>2</sup> A  $^{68}\text{Ga}^{3+}$  komplexálására főleg makrociklusos NOTA, DOTA és a szemi-makrociklusos AAZTA, illetve azok származékai alkalmasak.<sup>3</sup>



A DATA<sup>m</sup> ligandum (AAZTA származék, egy metil csoportot tartalmaz egy acetát helyett) és a Ga(DATA<sup>m</sup>) komplex sajátosságait pH-potenciometriás, spektrofotometriás,  $^1\text{H}$  és  $^{71}\text{Ga}$  NMR módszerekkel tanulmányoztuk. A Ga(DATA<sup>m</sup>) stabilitása gyakorlatilag megegyezik a Ga(AAZTA) komplexével.<sup>4</sup> A Ga(DATA<sup>m</sup>) esetében a Ga(AAZTA) komplexhez hasonlóan Ga(L)OH részecske képződik pH>5-nél. Az ML és M(L)OH közötti átalakulás lassú folyamat,  $^1\text{H}$  NMR spektroszkópián követhető. A Ga(DATA<sup>m</sup>) fémioncsere és ligandumcsere reakciói a Ga(L)OH részecske spontán és OH<sup>-</sup>-katalizált disszociációján át történnek Cu<sup>2+</sup>-ionnal és transferrinnel, mintegy kétszer olyan gyorsan, mint a Ga(AAZTA) tapasztaltuk (Ga(DATA<sup>m</sup>):  $t_{1/2} = 11$  óra), ami még elfogadható a  $^{68}\text{Ga}$  ( $\tau_{1/2} = 68$  perc) esetében.

<sup>1</sup> Szilvási István: *Nukleáris medicina*, Medicina Könyvkiadó Zrt., Budapest, **2010**

<sup>2</sup> T. J. Wadas, E. H. Wong, G. R. Weisman, C. J. Anderson, *Chem. Rev.* **2010**, *110*, 2858–2902.

<sup>3</sup> E. W. Price, C. Orvig, *Chem. Soc. Rev.*, **2014**, *43*, 260 – 290

<sup>4</sup> Zs. Baranyai, F. Uggeri, A. Maiocchi, G. B. Giovenzana, C. Cavallotti, A. Takács, I. Tóth, I. Bányai, A. Bényei, E. Brucher, S. Aime, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2013**, 147 – 162.

**Köszönetnyilvánítás:** A munka az Országos Tudományos Kutatási Alapprogram (K-109029) támogatásával valósult meg.

## A két belsőszférás vízmolekulát tartalmazó Gd(CyAAZTA)(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> komplex fizikai-kémiai sajátosságainak vizsgálata

Vágner Adrienn<sup>a</sup>, Lorenzo Tei<sup>b</sup>, Tóth Imre<sup>a</sup>, Brücher Ernő<sup>a</sup>, Silvio Aime<sup>c</sup>, Baranyai Zsolt<sup>a,d</sup>

<sup>a</sup> Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem

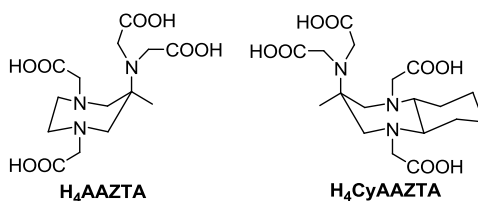
<sup>b</sup> Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologica (DiSIT), Università degli Studi del Piemonte Orientale "A. Avogadro"

<sup>c</sup> Department of Molecular Biotechnology and Health Sciences, Molecular Imaging Center, University of Torino

<sup>d</sup> Bracco Imaging - CRB/Discovery Trieste

e-mail: vagner.adrienn@science.unideb.hu

A klinikai vizsgálatokban a Gd<sup>3+</sup>-ionnak a nyíltláncú DTPA, a makrociklusos DOTA és azok származékaival képzett komplexeit alkalmazzák MRI kontrasztanyagként. Ezekben a komplexekben a ligandumok 8 donoratommal koordinálnak a Gd<sup>3+</sup>-hoz, míg a kilencedik koordinációs helyet egy vízmolekula tölti be. Az MRI kontrasztanyagok relaxivitása fokozható két vízmolekulát tartalmazó Gd(III)-komplexek alkalmazásával. Korábbi vizsgálatok szerint a szemi-makrociklusos GdAAZTA komplexben két vízmolekula van, és ezek gyorsan cserélődnek az oldószer vízmolekulákkal.<sup>1</sup> Sajnos a Gd(AAZTA)(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> kinetikai inertsége lényegesen elmarad a makrociklusos Gd(DOTA)(H<sub>2</sub>O) és származékaitól.<sup>2</sup>



1. ábra A H<sub>4</sub>AAZTA és a H<sub>4</sub>CyAAZTA ligandumok szerkezeti képlete

Mivel egy ciklohexil csoport beépítése lényegesen növelheti a ligandum vázának merevségét, és ezzel a képződő komplexek stabilitási állandóját és kinetikai inertségét,<sup>3</sup> ezért vizsgáltuk a M(CyAAZTA) komplexek egyensúlyi, kinetikai, szerkezeti és relaxációs sajátosságait pH-potenciometriás, relaxometriás, UV-Vis és <sup>1</sup>H-NMR spektroszkópiás módszerekkel. (M<sup>n+</sup>: Ca<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, Pb<sup>2+</sup>, Ln<sup>3+</sup>). A M(CyAAZTA) komplexek stabilitása 1-2 nagyságrenddel kisebb ugyan, mint az M(AAZTA) komplexeké, de a savkatalizált fémioncsere reakciói két nagyságrenddel lassabbak, mint a Gd(AAZTA) esetében. A nagyobb kinetikai inertség a komplex merevebb szerkezetével értelmezhető. A Gd(CyAAZTA) relaxivitása nagyon jó,  $r_{1p}=8.3 \text{ mM}^{-1}\text{s}^{-1}$ , ami Gd(CyAAZTA) nagyobb méretével és lassabb rotációs mozgásával értelmezhető.

<sup>1</sup> S. Aime, et al., *Inorg. Chem.*, **2004**, *43*, 7588–7590;

<sup>2</sup> Zs. Baranyai et al., *Chem. Eur. J.*, **2009**, *15*, 1696-1705;

<sup>3</sup> D. W. Margerum et al., *Inorg. Chem.* **1970**, *9*, 1814

**Köszönetnyilvánítás:** A munka az OTKA (K-109029) támogatásával valósult meg.

### Neodímium-glükonát komplexek oldategyensúlyi és -szerkezeti jellemzése

*Varga Norbert<sup>a,d</sup>, Kutus Bence<sup>a,d</sup>, Peintler Gábor<sup>b,d</sup>, Pálinkó István<sup>c,d</sup>, Sipos Pál<sup>a,d</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

<sup>c</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

<sup>d</sup> Szegedi Tudományegyetem, Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport

e-mail: varga.norbert.1@stud.u-szeged.hu

A kis- és közepes aktivitású radioaktív hulladéktárolókban lejátszódó kémiai folyamatok hosszú távú modellezését alapvetően befolyásolják a különböző fémionok és szerves ligandumok közt lejátszódó komplexképződési reakciók. A három vegyértékű aktinoidák (pl. Cm(III), Am(III)), valamint a különböző szerves vegyületek gyakori modelljeként használják a neodímiumot és nátrium-D-glükonátot ( $\text{Gluc}^-$ ). A korábbi kutatási eredményekre [1–3] alapozva munkánk célja esetleges új komplexek kimutatása és a képződő részecskék oldatbeli szerkezetének vizsgálata volt.

Méréseinket UV-Vis spektrofotometriás, pH-potenciometriás, konduktometriás, illetve  $^1\text{H}$  és  $^{13}\text{C}$  NMR-spektroszkópiai módszerek segítségével hajtottuk végre. A konduktometriás mérések igazolták, hogy a  $\text{NdCl}_3$  és  $\text{NaGluc}$  oldatához  $\text{NaOH}$ -ot adagolva a vezetés nem nő jelentős mértékben, ami  $\text{OH}^-$  megkötődéssel járó komplexképződésre utal. A neodímium akvakomplexének spektruma nagymértékben függ mind a  $\text{Gluc}^-/\text{Nd}^{3+}$  molaránytól, mind a pH-tól (utóbbi hatását a pH-metriás titrálások is alátámasztották). A 25 °C-on, 1 M ionerősségen és  $1,2 < \text{pH} < 7,8$  tartományban végrehajtott spektrofotometriás és potenciometriás mérések együttes illesztése alapján a feltétezzhető komplexek a következők:  $[\text{NdGluc}_2]^+$ ,  $[\text{NdGluc}]^{2+}$ ,  $[\text{NdGluc}_3]^0$ , illetve  $[\text{NdGlucH}_2]^0$ ,  $[\text{NdGluc}_2\text{H}_1]^0$ ,  $[\text{Nd}_2\text{G}_2\text{H}_3]^+$  és  $[\text{Nd}_2\text{G}_3\text{H}_2]^+$ . Eredményeink azt is mutatják, hogy a  $\text{Nd}^{3+}$  szívesen képez nagy stabilitású, többmagvú komplexeket glükonát jelenlétében.

$^1\text{H}$  és  $^{13}\text{C}$  NMR-mérések bizonyították, hogy a fémion a karboxilátion mellett elsősorban C2 és C3 pozíciókban található hidroxilcsoportokhoz koordinálódik. A  $6 < \text{pH} < 8$  tartományban felvett spektrumok deprotonálódott komplexek jelenlétére utalnak.

[1] N. A. Kostromina, T. V. Ternovaya, *Russ. J. Inorg. Chem.*, **1966**, *11*, 381–385.

[2] C. Panda C., R. K. Patnaik, *J. Indian Chem. Soc.*, **1976**, *53*, 1079–1083.

[3] Z. Zhang *et al.*, *J. Alloy Compd.*, **2007**, *444–445*, 470–476.

## A Ce(IV) és víz közötti fotokatalizált reakció kvantitatív kinetikai leírása

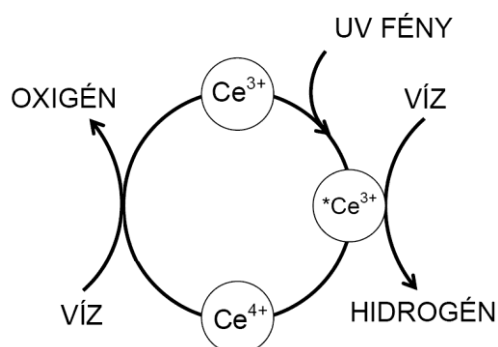
Kerekes Péter<sup>a</sup>, Kiss Virág<sup>a</sup>, Ősz Katalin<sup>a</sup>, Lente Gábor<sup>b</sup>, Fábrián István<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

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

Ha egy Ce(IV)-ionokat tartalmazó savas vizes oldatot polikromatikus fénnel – pl. egy diódasoros spektrofotométer lámpájával – világítunk meg, akkor a reakcióban Ce(III) és oxigéngáz keletkezik. Ez a reakció a Ce(III)-ionok által katalizált fotokémiai vízbontásnak [1] az egyik fél-reakciója, amely termodinamikailag kedvezményezett, ugyanakkor a fény katalizálja.



**1. ábra:**  
A fény által katalizált  
fotokémiai vízbontási ciklus

Az általunk használt AnalytikJena S600 típusú diódasoros spektrofotométer fényintenzitását aktinometriás méréssel határoztuk meg, és az értéke a teljes (200-1100 nm) hullámhossztartományra  $1,7 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ . [2]

A fotoreakció sebessége, valamint a reaktáns és termék Ce(III/IV) komplexek spektruma is függ attól, hogy milyen savat használunk a hidrolízis visszaszorítására. Kísérleteink során kénsavas, salétromsavas, sósavas és perklórsavas közegben dolgoztunk. Ezek közül perklórsavban mértük a legnagyobb reakciósebességeket.

Részletes matematikai leírásmódot dolgoztunk ki a kinetikai görbék kiértékelésére. Egyetlen gerjesztési folyamatot feltételezünk, emellett figyelembe vettük, hogy a moláris abszorpciós koefficiensek koncentráció-függőek lehetnek állandó perklórsav-koncentráció mellett is, a különböző Ce:perklórsav arányoknál domináló különböző komplexek miatt.

[1] L.J. Heidt, A.F. McMillan *Nature*, **1953**, 117, 75-76

[2] T. Lehóczki, É. Józsa, K. Ősz *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, **2013**, 251, 63-68

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatást az OTKA (NK105156) és az NTP-HHTDK-15-0047 támogatta.

## Korai lantanoida-porfirin komplexek szerkezetének és képződésének érdekességei

*Kiss Melitta Patrícia, Valicsek Zsolt, Horváth Ottó*

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék  
kiss.melitta.p@gmail.com

A porfint mint az egyik legerősebb fényelnyeléssel rendelkező vegyületet négy pirrolgyűrű alkotja, melyeket metilidin-hidak kötnek össze, így kialakul egy síkban konjugált kötésrendszert tartalmazó váz. Ha az üregébe koordinálódó fémion sugara a 70-90 pm határérték felett van, valamint nem kedvezményezett oktaéderes vagy síknégyszetes komplex kialakulása, a fémion nem illeszkedik a porfin koordinációs üregébe, hanem annak síkja felett helyezkedik el, és kupolásan torzítja azt; síkon kívüli (out-of-plane = OOP vagy sitting-atop = SAT) komplexek keletkeznek. A porfin támadhatóbbá válik a felület másik oldalán, így bonyolultabb szendvicsszerkezetek is kialakulhatnak. A lantanoida(III) fémionok sugara 97-116 pm között változik, így ezek alkalmasak a SAT porfirin-komplexek tulajdonságainak vizsgálatára [1].

Munkánk során vizsgáltuk axiális ligandumok (acetát-, klorid- és perklorátion, glicerin, etil-alkohol) hatását a komplexképződésre. Ezekről függően alakulhat ki mono- és biszporfirin komplex. Utóbbi keletkezése során a fényelnyelési és ~kisugárzási sajátságok alig változnak, ami gyenge  $\pi$ - $\pi$  kölcsönhatásra utal [2]. A hőmérséklet változtatásával pedig befolyásolhatónak találtuk a fémion koordinációs helyét: a lantanoida(III) ion kapcsolódhat a ligandum üregéhez (fej-fej kapcsolat) vagy az oldalláncokon lévő szulfonáto-fenilcsoportokhoz (létrehozva a farok-farok kapcsolatot) [3].

[1] Valicsek, Z.; Eller, G.; Horváth, O.; *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 13120–13131.

[2] Imran, M., Szentgyörgyi C., Eller G., Valicsek Z., Horváth O.; *Inorg. Chem. Comm.* **2015**, *52*, 60-63.

[3] Kiss, M. P.; Imran, M.; Szentgyörgyi, C.; Valicsek, Z.; Horváth, O.; *Inorg. Chem. Commun.* **2014**, *48*, 22-25.

**Köszönetnyilvánítás:** A munka megvalósítását az OTKA NN107310 és K101141, a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 és az OMAA 86öu3 és 90öu2 projektek támogatták.

## Egy flexibilis PNP ligandum Ag(I)-komplexeinek oldatfázisú NMR vizsgálata. Esettanulmány.

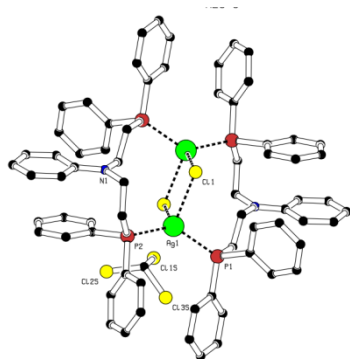
*Szalontai Gábor<sup>a</sup>, Párkányi László<sup>b</sup>, Besenyei Gábor<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> Pannon Egyetem, Kémiai Intézet, NMR laboratórium

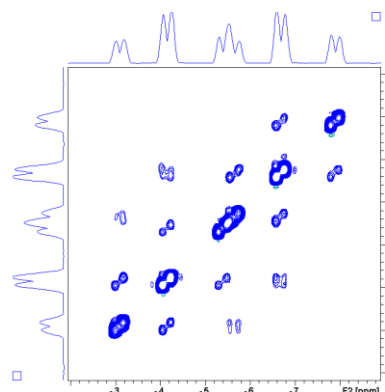
<sup>b</sup> MTA Természettudományi Kutatóközpont

e-mail: Szalontai.Gabor@solidnmr.hu

Az ún. PNP ligandumok a használt koordinációs helyek számától függően változatos szerkezetű komplexeket alakítanak ki különböző fémekkel [1]. Ezek a komplexek oldatfázisban gyakran képeznek dimereket, illetve vesznek részt kémiai cserefolyamatokban. Az NMR-spektroszkópia széles körben alkalmazott módszer a létrejövő szerkezetek és egyensúlyaik tanulmányozására. Az előadásban azokra az eljárásokra mutatunk példákat, amelyek hasznosan alkalmazhatók ilyen célra, és egyben jellemezzük az általunk vizsgált PNP-ligandum, az *N,N*-bisz(2-difenilfoszfinoetil)-anilin, Ag(I) komplexeinek ( $[AgX(PNP)]_2$ , X = Cl, Br, I, OTf) oldatbeli viselkedését is.



Az  $[AgCl(PNP)]_2$  komplex molekulaszervezete



Az  $[AgCl(PNP)]_2/[AgI(PNP)]_2$  elegy  $^{31}P$ - $^{31}P$  cserespektruma

Kristályos fázisban tetraédes  $Ag^+$  koordináció mellett dimer komplexek létezését igazoltuk. Vizsgálataink szerint – többek között rotációs és translációs diffúziós együtthatók meghatározásának alapján – oldatfázisban is dimer szerkezetek a jellemzők, amelyek egymással az NMR időskálán lassú kémiai csereegyensúlyt mutatnak. A vegyes dimerek esetén a triflát-halogén párosok, pl.  $[Ag_2I(OTf)(PNP)_2]$ , kiugróan magas termodinamikai stabilitást mutattak.

[1] Q. Dong, M. J. Rose, W. Y. Wong, H. B. Gray, *Inorg. Chem.* **2011**, *50*, 10213–10224.

### A Wilson betegség kezelésére potenciálisan alkalmas Cu(I) kelátorok

*Mesterházy Edit<sup>a</sup>, Jancsó Attila<sup>a</sup>, Colette Lebrun<sup>b</sup>, Tömösi Ferenc<sup>a</sup>, Pascale Delangle<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

<sup>b</sup> CEA, Université Grenoble Alpes, INAC-SyMMES

e-mail: medit90@chem.u-szeged.hu

A Wilson betegség kialakulásáért a májban található ATP7B nevű rézszállító fehérje mutációból eredő működési zavara felelős, melynek következtében a Cu(I) felhalmozódik a májsejtekben.[1] A jelenleg alkalmazott gyógymódok számos mellékhatással rendelkeznek és nem specifikusak.[2] Projektünkben hatékony, májsejteket célzó, Cu(I) kötő, peptid alapú kelátorok kifejlesztésén dolgozunk. A ligandumok tervezésénél az Atx1 rézchaperon fehérje MxCxxC szekvenciájú fémkötő szakaszát vettük alapul, azonban a peptidekbe egy harmadik ciszteint is beépítettünk a nagyobb affinitás reményében. A ciszteinek szekvencián belüli pozíciójának változtatásával próbáltuk a legkedvezőbb fémkötő sajátságokat megtalálni.

Az így tervezett ligandumok lineáris és ciklikus változatának Cu(I)-kötő tulajdonságait UV-Vis spektroszkópiával és tömegspektrometriával vizsgáltuk. Mivel mind a ligandumok, mind a fémion rendkívül érzékeny az oxidációra, a kísérletek kivitelezése szigorúan inert atmoszférában történt. A peptidek Cu(I) ionnal való titrálásakor a jellegzetes tiolát→Cu(I) töltésátviteli sávhoz rendelhető abszorbancia lineárisan növekszik 2 ekvivalensnyi fémion hozzáadásáig. A rézcentrumokra vonatkoztatott moláris abszorbanciák  $\sim 6000\text{-}7000\text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$  értékei összhangban vannak korábbi eredményekkel.[4,5] A Cu(I) felesleg jelenlétében megjelenő kis energiájú ( $\lambda = 340\text{ nm}$ ) sáv többmagvú részecskék kialakulására utal, melyek jelenlétét ESI-MS mérések is megerősítették. A kizorításos kísérletekkel meghatározott látszólagos kötési állandók ( $\log K \sim 17.3\text{-}18.1$ ) hasonlóak más 3-Cys tartalmú kelátorok Cu(I)-komplexeinek stabilitásához.[4] Az eredmények alapján egyszerűbb, merevebb szerkezetű ligandumok szintézisét tervezzük a Cu(I)-affinitás növelése érdekében.

[1] I. Scheiber, R. Dringen, J.F.B. Mercer, *Met. Ions Life Sci.*, **2013**, 13, 359

[2] J.D. Gitlin, *Gastroenterology*, **2003**, 125, 1868

[3] R.A.Pufahl; C. P Singer; K. L Peariso; S.-J.Lin; P. J Schmidt; C. J Fahrni; V. C Culotta; J. E Penner-Hahn; T. V O'Halloran, *Science*, **1997**, 278, 853

[4] A.M. Pujol; C. Gateau; C. Lebrun; P. Delangle, *Chem. Eur.J.*, **2011**, 17, 4418

[5] D. L. Pountney, I. Schauwecker, J. Zarn, M. Vasak, *Biochemistry*, **1994**, 33, 9699



## Rákellenes Rh(III)( $\eta^5$ -C<sub>5</sub>Me<sub>5</sub>)-komplexek összehasonlító oldategyensúlyi vizsgálata

*Enyedy Éva A.<sup>a</sup>, Dömötör Orsolya<sup>b</sup>, Mészáros János P.<sup>a</sup>, Carmen M. Hackl<sup>c</sup>, Wolfgang Kandioller<sup>c</sup>, Bernhard K. Keppler<sup>c</sup>*

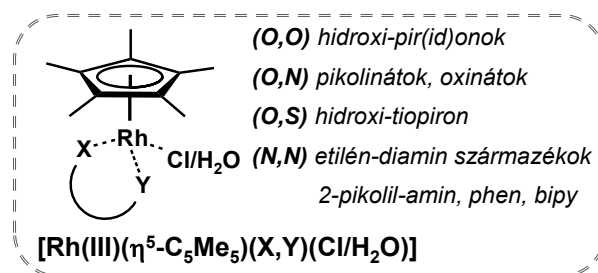
<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport

<sup>c</sup> Institute of Inorganic Chemistry, University of Vienna

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

A rákellenes ruténium vegyületek különös figyelmet kapnak napjainkban néhány komplex klinikai (*Ru(III)*): *NKP-1339*, *NAMI-A*), ill. preklínikai (*Ru(II)*): *RAPTA-C*) sikerei kapcsán. A *Ru(II)*-arén komplexekkel izoelektronos félszendvics ródium(III) vegyületek iránti érdeklődés is megnőtt elsősorban az  $\eta^5$ -arenil csoport bevezetésével megnövelt ligandumcsere sebesség és a koordinált ligandumok variálhatósága miatt [1]. Az irodalomban megtalálható Rh(III)( $\eta^5$ -C<sub>5</sub>Me<sub>5</sub>)-komplexek nagy száma ellenére oldatbeli stabilitásukról, szérumszuszpenzióval való kölcsönhatásukról kevés információ áll a rendelkezésünkre, viszont ezek a tulajdonságok alapvetően befolyásolhatják a farmakokinetikai paramétereket és a hatásmechanizmust.



Munkánk során a Rh(III)( $\eta^5$ -C<sub>5</sub>Me<sub>5</sub>) különböző típusú kétfogú ligandumokkal képzett komplexeinek jellemezzük szilárd fázisú szerkezetét, oldatbeli stabilitását, a Cl<sup>-</sup>/H<sub>2</sub>O-csere egyensúlyi folyamatait, humán szérumszuszpenzióval való kölcsönhatását [2]. Alapvetően arra a kérdésre keressük a választ, hogy ezek a tulajdonságok hogyan és milyen mértékben befolyásolják a fenti organoródium komplexek változatos antiproliferatív hatását.

[1] Y. Geldmacher et al., *Inorg. Chim. Acta*, **2012**, 393, 84.

[2] O. Dömötör et al., *J. Inorg. Biochem.*, **2014**, 134, 57; É.A. Enyedy et al., *J. Coord. Chem.*, **2015**, 68, 1583; É.A. Enyedy et al., *J. Inorg. Biochem.*, **2016**, 152, 93.

**Köszönetnyilvánítás:** OTKA PD103905, Bolyai János Kutatási Ösztöndíj

### Inverz polaritású P=C kötések tartalmazó molekulák komplexei

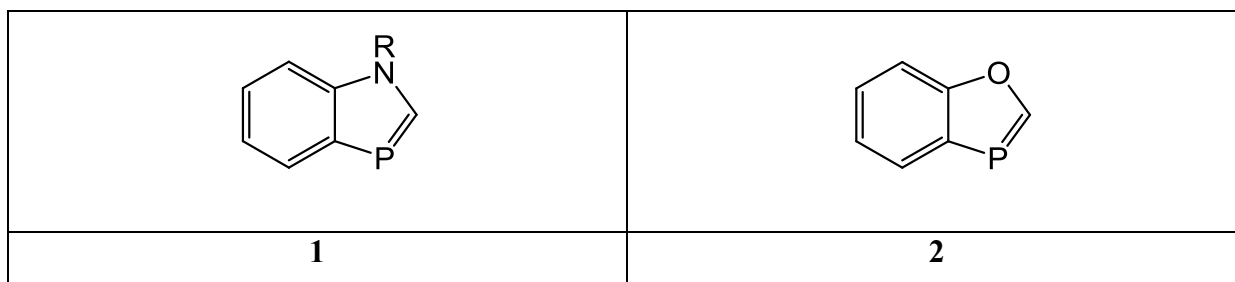
Nyulászi László<sup>a</sup>, Szieberth Dénes<sup>a</sup>, Joachim W. Heinicke<sup>b</sup>, John Protasiewicz<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szervetlen és Analitikai kémia Tanszék  
1111 Budapest Szt Gellért tér 4

<sup>b</sup> Institut für Biochemie (Anorganische Chemie), E.-M.-A.-Universität Greifswald, 17487  
Greifswald (Germany)

<sup>c</sup> Department of Chemistry, Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, 44106, USA.  
e-mail: nyulaszi@mail.bme.hu

A szerves foszfánok változatos reakciókban felhasználható katalizátorok ligandumjaiként ismertek, ahol a datív kötést a foszfor magános párja alakítja ki. A foszfor-szén kettős kötést tartalmazó rendszerek esetén a korábbiakban szintén a molekulák síkjában található magános pár komplexképzését írták le. A közelmúltban 1,3-benzazafoszfol (**1**) higany-, továbbá rézkomplexei esetén egyedülálló  $\eta^2$ -koordinációt észleltünk [1]. A korábbiak továbbfejlesztéseképpen egy új ligandum, az 1,3-benzoxafoszfolok (**2**) [2] komplexképzési sajátosságait vizsgáljuk, összevetve a különféle komplexek relatív stabilitását az azafoszfol analógokkal.



[1] M. Ghalib, L. Könczöl, L. Nyulászi, P. G. Jones, G. Palm, J. W. Heinicke *Dalton Transactions*, **2014**, 43, 51-54; M. Ghalib, L. Könczöl, L. Nyulászi, G. J. Palm, C. Schulzke, J. W. Heinicke *Dalton Transactions* **2015**, 44, 1769-1774; M. Ghalib, P. G. Jones, C. Schulzke, D. Sziebert, L. Nyulászi, J. W. Heinicke *Inorg. Chem.* **2015**, 54, 2117–2127.

[2] S. Wu, A. L. Rheingold, J. D. Protasiewicz *Chem. Commun.*, **2014**, 50, 11036—11038.

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönik az OTKA K 105417, illetve a COST CM1302 támogatását.

## Foszfa-urotropin módosítása vizes vagy oldószermentes közegben

*Udvardy Antal<sup>b</sup>, Szolnoki Csenge Tamara<sup>a</sup>, Joó Ferenc<sup>a,b</sup>, Kathó Ágnes<sup>a</sup>*

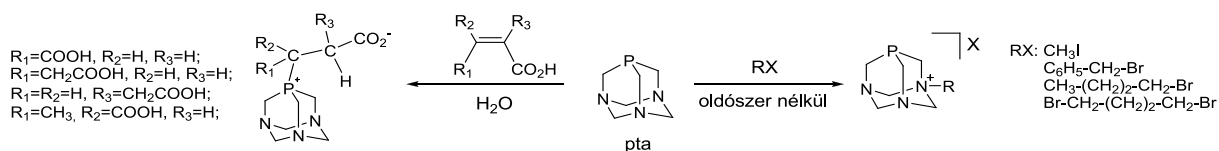
<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

e-mail: udvardya@unideb.hu

A fenntartható fejlődés érdekében környezetkímélő kémiai eljárásokra van szükség. A zöld kémia egyik alapelve szerint törekedni kell az oldószerek elhagyására, vagy ún. alternatív oldószerek alkalmazására. Az utóbbiak csoportjába sorolható a legősibb oldószerünk, a víz is.

A vizes közegű katalízisben használt fémkomplexek gyakran vízoldható foszfint tartalmaznak ligandumként, és egyre többen alkalmazzák az urotropin analóg semleges 1,3,5-triaza-7-foszfa-adamantánt (pta) [1]. Ionos származékai is könnyen nyerhetők a foszfin és a megfelelő alkilezőszer acetonos oldatának forralásával, de víz jelenlétében melléktermékek is keletkeznek [2]. Kimutattuk azonban, hogy a pta csaknem kvantitatív mértékben reagál az alkil-halogenidekkel oldószermentes körülmények között:



Míg az N-alkilezéshez a víz nem kívánatos, addig P-szubsztituált származékok képződését ebben a közegben vizsgáltuk. A foszfin és az olefin- vagy acetiléndikarbonsavak addíciós reakciójában keletkezett foszfa-betainokat különféle módszerekkel ( $^{13}\text{C}$ -,  $^{31}\text{P}$ -NMR spektroszkópia, ESI-MS, elemanalízis) jellemeztük, és szilárd fázisú molekulaszervezetüket is meghatároztuk egykristály röntgendiffrakciós módszerrel [3]. Egykristályt nyertünk abból spirofoszforán-típusú vegyületből is, amelyet a P-(2-karboxietil)-pta oldószermentes körülmények közötti N-metilezésével állítottunk elő.

[1] A. D. Phillips, L. Gonsalvi, A. Romerosa, F. Vizza, M. Peruzzini, *Coord. Chem. Rev.*, **2004**, 248,

955; J. Bravo, S. Bolano, L. Gonsalvi, M. Peruzzini, *Coord. Chem. Rev.*, **2010**, 254, 555

[2] D. J. Daigle, A. B. Pepperman Jr., *J. Heterocycl. Chem.*, **1975**, 12, 579

[3] A. Udvardy, M. Purgel, T. Szarvas, F. Joó, Á. Kathó, *Struct. Chem.*, **2015**, 26, 1323

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA-NKFIH (K 101372) anyagi támogatásával valósult meg.

Udvardy Antal köszöni az MTA Posztdoktori Kutatói Program támogatását.

### Az ionerősség és az axiális ligandum hatása a vízdoldható ezüst-porfirin komplexek képződésére és oligomerizációjára

*Valicsek Zsolt, Sebestyén Arnold Károly, Németh Bálint, Harrach Gergely<sup>†</sup> és Horváth Ottó*  
Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék  
e-mail: valicsek@almos.uni-pannon.hu

A biokémia egyik legjelentősebb vegyületcsaládját képező porfirinek komplexei közül megkülönböztetett figyelmet szentelnek az úgynevezett síkon-kívüli szerkezettel rendelkezőknek, melyek kialakulásáért a fémion mérete és koordinációs hajlama is felelős [1]. Kutatócsoportunkban elsősorban a témakör mintapéldáinak számító másodfajú fémionok komplexeinek képződését vizsgáljuk kinetikai és egyensúlyi szempontból [2]. Az ezüst-porfirinnek keletkezése többszörösen összetett folyamat, mivel két ezüst(I)ion képes koordinálódni egy porfirinhez, az így létrejövő kétmagvú komplexben pedig az ezüst(I)ionok ritka diszproporciója megy végbe [3]. Különböző fémion- és (anionos) porfirin-koncentráció, illetve az ionerősség növelése mellett azt tapasztaltuk, hogy az ezüst(II)ion komplexe dimerizálódott is. Meghatároztuk az egyes részreakciók sebességi állandóit, továbbá sikerült kimutatnunk az eddig azonosítatlan ezüst(I)ion 1:1-es (fémion:porfirin) komplexét az egyedi moláris, UV-látható fényelnyelési színeképének kimérésén keresztül.

Ammónia – mint potenciális axiális ligandum – jelenléte gátolta az ezüst(I)ion porfirinbe épülését, azonban a már kialakult ezüst(II)-porfirinhez koordinálódva elősegítette annak további oligomerizációját. Ha viszont víz helyett metanolt vagy etanolt használtunk oldószerként, akkor egyáltalán nem ment végbe a dimerizáció sem.

- [1] O. Horváth, Zs. Valicsek, G. Harrach, G. Lendvay, M. A. Fodor, *Coord. Chem. Rev.* **2012**, 256, 1531-1545.  
[2] Zs. Valicsek, O. Horváth, *Microchem. J.* **2013**, 107, 47–62.  
[3] G. Harrach, Zs. Valicsek, O. Horváth, *Inorg. Chem. Commun.* **2011**, 14, 1756–1761.

**Köszönetnyilvánítás:** A munka megvalósítását az OTKA NN107310, a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 és az OMAA 86öu3 és 90öu2 projektek támogatták.

## Alkalmasek-e a peptidkomplexek a metalloproteinek jellemzésére?

### A prionfragmensek komplexképződési folyamatai

*Sóvágó Imre*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, H-4010 Debrecen

A prion betegségek (Creutzfeldt-Jakob kór, kerge marha kór, stb.) a viszonylag ritka neurodegeneratív elváltozások csoportjába tartoznak, a betegség fertőző jellege azonban ennek ellenére komoly kihívást jelent az emberiség számára. A human prion fehérje (HPrP) N-terminális rendezetlen tartománya összesen 6 hisztidin aminosavat tartalmaz, amelyek számos átmenetifém-ion – különösen a réz(II) – számára fontos kötési helyet jelentenek. A szekvencia további fontos jellemzője, hogy csak kis számban tartalmaz egyéb, fémion koordinációra hajlamos oldalláncokat, így a fehérje egyes fragmensei a multihisztidin peptidek koordinációs viszonyainak modellezésére is alkalmasak lehetnek. Az elmúlt 10 év során mintegy 20 természetes fragmens és ezek különböző mutánsai komplexképződési folyamatait vizsgáltuk elsősorban réz(II) és kisebb számban nikkel(II), cink(II), palládium(II), mangán(II) és kadmium(II) ionokkal. A különböző hosszúságú peptidek a 4 és 55 közötti tartományban tartalmaztak aminosavakat, míg a bennük lévő hisztidinek száma 1-6 között változott. Fontos azt is kiemelni, hogy az egyes peptidek, amelyek azonos számban tartalmaztak hisztidint a prion fehérje különböző tartományait fedték le, lehetővé téve az egyes kötési helyek preferenciájának megállapítását is. Az eredményekből nyilvánvalóvá vált, hogy a több hisztidint tartalmazó fragmensek mindegyike kiugróan jó rézkötő képességgel rendelkezik, az egyes pH-tartományokban az uralkodó részecskék sztöchiometriai összetétele azonban a fémion/ligandum arányon túlmenően elsősorban a hisztidinek számának és egymáshoz viszonyított helyzetének függvénye. Az eredmények így a címben felvetett kérdés megválaszolására, illetve az azzal kapcsolatos vitára is lehetőséget adnak.

### Fémionok szerepe az Alzheimer-kór kialakulásában

*Penke Botond, Datki Zsolt, Fülöp Livia*

SZTE Orvosi Vegytani Intézet

A neurodegenerációs betegségek legnagyobb részének több közös tulajdonsága van. Legfontosabb ezek között a hibás szerkezetű fehérjék megjelenése, fehérje aggregátumok (amiloidok) képződése és kicsapódása a központi idegrendszerben. Ez a fehérje folding zavarára utal. A demenciával, a tanulási és memória funkciók romlásával járó Alzheimer-kór (AK) esetén  $\beta$ -amiloid ( $A\beta$ ) és tau fehérje akkumulálódik az agyban. A toxikus amiloid konformációk kialakulásáról bizonyított, hogy az öregedési folyamat kedvez a képződésüknek. Nem tisztázott viszont, hogy pontosan milyen faktorok játszanak kulcsszerepet a toxikus szerkezetek spontán képződésében. Mai tudásunk szerint fehérje-lipid membrán kölcsönhatások vagy a fémionok redisztribúciós zavara indíthatja el az amiloid képződést.

Az AK kialakulásában kiemelt szerepet játszhat az idegsejtek  $Ca^{2+}$ -homeosztázisának felborulása (Ca-hipotézis). Az AK  $\beta$ -amiloid hipotézise szerint a hibás konformációjú  $A\beta$  önmagában is képes előidézni a sejtek Ca-ciklusának zavarát, meggátolva a neuronok aktivitását a memória rögzítés folyamatában. Ebben több sejtsejtszervecske (pl. mitokondrium, endoplazmás reticulum) és receptor (pl. szigma-1 receptor (S1R)) is érintett.

A toxikus  $\beta$ -amiloid szerkezetek kialakulásánál fontos lehet néhány nehézfémion ( $Zn^{2+}$ ,  $Cu^+/Cu^{2+}$ ) homeosztázisának zavara az agyban, ezek a fémionok is az AK gyógyszerkutatások célpontjai. A magas vérnyomás kezelésére használt Zn-keletor, a Perindopril jól ismert ACE-inhibitor, könnyen bejut az agyba is. Kísérleteinkben ez a gyógyszer neuroprotektív hatást mutatott az AK egyik állatmodelljén, a humán  $A\beta$ -túltermelő APPxPS1 transzgen egértörzsben. A hatás pontos mechanizmusát nem ismerjük, de feltehetően a  $Zn^{2+}$  vagy más nehézfémion redisztribúciójának regulációjával függ össze.

## Alzheimer-kór, $\beta$ -amiloid és komplexképzők

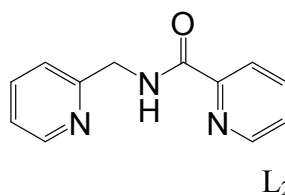
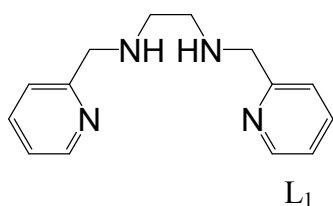
*Jakusch Tamás<sup>a</sup>, Kiss Tamás<sup>a,b</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport

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

Az Alzheimer-kór (AD) elleni gyógyszerkutatások lassan évtizedes sikertelensége arra utal, hogy nem sorolható a tipikus “egy kór, egy enzim, egy hatóanyag” megbetegedések közé [1]. A fémionháztartás (Fe(II/III), Zn(II) and Cu(I,II)) felborulása csak egy tünete ennek az összetett betegségnek. A felsorolt ionok mM-os koncentrációban találhatóak meg a  $\beta$ -amiloid plakkokban. ezen eszenciális fémionok újra hasznosíthatóvá tétele, egy komoly kihívás az AD kemoterápiás kezelésében [2]. A Zn(II)- $\beta$ -amiloid komplex könnyen aggregál, nem toxikus, míg Cu(II)- $\beta$ -amiloid rendszerben mérgező oligomerek képződnek, amelyek reaktív oxigén részecskéket termelnek [3]. A homeosztázis helyreállítása érdekében el kell kerülni, hogy az alkalmazott kelátor fémionokat, pl. Cu(II) ionokat távolítsa el az agyból; vissza kell juttatni a szervezet fémionszállító mechanizmusába. Ehhez megfelelő stabilitású és szelektivitású komplexképzőre van szükség [2].



Polipropilén-maltóz (PPI-mal) dendrimerek jelenlétében a Zn(II) ionok elősegítik a Zn(II)- $\beta$ -amiloid aggregációját, míg Cu(II)ionok nem; a  $L_1$  ligandum képes megállítani ezt a folyamatot. Az  $L_2$  ligandumot Cu(II) specifikusnak terveztük, köszönhetően a fémion indukálta amidnitrogén deprotonálódásnak.

[1] F. Mangialasche; A. Solomon; B. Winblad; P. Mecocci; M. Kivipelto, *Lancet Neurol.*, **2010**, *9*, 702.

[2] A. Robert; Y. Liu; M. Nguyen and B. Meunier, *Acc. Chem. Res.*, **2015**, *48*, 1332.

[3] K.P. Kepp; *Chem. Rev.*, **2012**, *112*, 5193.

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönetet mondanak Dietmar Appelhans-nak a Leibniz Institute of Polymer Research-ből (Hohe Strasse 6, D-01069 Dresden, Germany), hogy a PPI-mal-dendrimer-eket rendelkezésünkre bocsájtotta.

## NGR peptid – Gd-kelet konjugátumok előállítása és alkalmazásuk hatékony tumordiagnosztikára

*Mező Gábor<sup>a</sup>, Enyedi Kata Nóra<sup>a</sup>, Trencsényi György<sup>b</sup>, Kertész István<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Nukleáris Medicina Intézet

Egyre nagyobb jelentőségre tesznek szert azok az irányító molekulák, amelyek segítségével hatóanyagok vagy jelzőanyagok juttathatók szelektíven tumorsejtekbe. Ilyen irányító molekulák lehetnek peptidek, amelyek tumorspecifikus receptorokat vagy a tumorsejteken nagy mennyiségben kifejeződő receptorokat ismernek fel. Jelen munkánkban Asn-Gly-Arg (NGR) szekvenciát tartalmazó ciklopeptideket vizsgáltunk, amelyek a CD13 receptort ismerik fel nagy hatékonysággal tumorsejteken és elsősorban a tumort benövő új ereken. Az NGR peptidek sajátja, hogy nem enzim hatására bekövetkező deamidáció folytán szukcinimid gyűrűt zárnak, majd hidrolízist követően  $\alpha$ - és  $\beta$ -aszpartil (DGR és *izo*DGR) származékká alakulnak. Érdekes módon, ez utóbbiak szintén kötődhetnek egy másik, a tumorsejteken túlermelődő receptorhoz, az RGD integrin receptorhoz. Ezért az NGR peptidek stabilitásának vizsgálata elengedhetetlen annak érdekében, hogy megfelelő származékokat állítsunk elő célzott tumorterápiára vagy nagy hatékonyságú tumordiagnosztikára. Munkánk során néhány kiválasztott NGR peptidet kapcsolunk olyan kelátorhoz, amelyek alkalmasak <sup>68</sup>Gd komplexálására, és vizsgáltuk a komplexek tumorban való dúsulását. Ezek alapján elmondhatjuk, hogy egy stabil c[KNGRE]-NH<sub>2</sub> irányító molekulát tartalmazó változat nagyon hatékony dúsulást mutatott tumorban, ami még az irodalomban jelenleg leggyakrabban alkalmazott vegyületnél is jobb eredménynek bizonyult.



## Az egykristály röntgendiffrakció alkalmazása a komplexek szerkezetkutatásában

*Bombicz Petra*

<sup>a</sup> Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest,  
Magyar tudósok körútja 2.

e-mail: bombicz.petra@ttk.mta.hu

A molekula és a kristályszerkezet feltérképezése a diffrakciós módszerek felfedezésével vált lehetővé. Ezáltal tudunk kapcsolatot teremteni a szerkezet és az anyag fizikai-kémiai tulajdonságai között, segítségével közelebb kerülünk az áhított cél, a megkívánt tulajdonságú anyagok előállításához. Az atomi felbontású kép ismeretében pl. reakciómechanizmust tárhatunk fel, vagy megérthetjük gyógyszerek hatásmechanizmusát. A módszerrel ásványi anyagok, szervetlen és szerves molekulák, fehérjék, sőt vírusok szerkezete határozható meg. A kutatások a molekuláris szerkezet felderítésén túl egyre inkább a másodlagos kölcsönhatások vizsgálatára fókuszálnak, hisz az anyag tulajdonságát nem csak az azt felépítő molekula, esetleg többfajta molekula, ion, hanem a köztük lévő intermolekuláris kölcsönhatások is meghatározzák. A szerkezetkutatás fontos eszköz az izostrukturalitás ill. a polimorfia jelenségének megértésében. A röntgendiffrakció lehetővé teszi királis rendszerek abszolút konfigurációjának a meghatározását.

Az előadásban példákat mutatunk be komplex vegyületek szerkezetére. Egyszerű komplex vegyületek összehasonlításából láthatjuk, hogy az eltérő másodlagos kötésrendszer eltérő kristályszerkezethez vezet. Többfajú szerves ligandummal kristályosodó réz és nikkell komplexek, bár összegképletük csak a fémion minőségében tér el, mégis alapvetően eltérő (só ill. semleges) szerkezetűek. Szerkezetigazolással tudtuk magyarázni, hogy egy komplexen belül azonos ligandumok különböző módon kötődnek a fémionhoz, ezért a ligandumok megkülönböztethetők a komplex analitikai vizsgálataiban is. Lítium difoszfánid vegyület sorozatban a lítiumion koordinációs száma kettő és nyolc között változik, összefüggés bizonyítható a Li-P távolság és a Li koordinációs száma között. Az első röntgendiffrakcióval igazolt szerkezetű kovalens Fe-Si kötéssel rendelkező szilolil komplexek is bemutatásra kerülnek.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönjük az anyagi támogatást az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok OTKA 100801 pályázatának.

**Réz(II)komplexek szerkezetvizsgálata elektronspin rezonancia  
spektroszkópia és egykristály röntgendiffrakció együttes alkalmazásával**

*May Nóra Veronika*

<sup>a</sup> Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest,  
Magyar tudósok körútja 2.  
e-mail: may.nora@ttk.mta.hu

A klinikai gyakorlatban gyógyszerként, kontraszt anyagnaként vagy fémkelátorként alkalmazott vegyületek a terápiás hatáson túl meg kell hogy feleljenek egy sor igen szigorú követelménynek, amelyeket alapvetően a komplexek fizikai-kémiai tulajdonságai (oldhatóság, stabilitás, szerkezet) határoznak meg. Az egykristály röntgendiffrakciós technika az egyik leghatékonyabb vizsgálati módszer szerves molekulák valamint fémkomplexeik szerkezetvizsgálatára, azonban biológiailag releváns minták esetén felmerül néhány nehézség. Egyrészt mérésre alkalmas egykristályok előállítása sokszor nehézségekbe ütközik. Másrészt vizes oldatokban különböző összetételű és szerkezetű komplexek együttesen vannak jelen, így a komplexek többsége nem vizsgálható. Harmadrészt pedig kiemelendő, hogy a röntgendiffrakciós módszer az anyag szilárd fázisában adja meg a komplexek szerkezetét amely az oldatfázisnál jóval erősebb másodlagos kölcsönhatások megjelenése miatt eltérhet az oldatban megfigyelhető szerkezettől. Réz(II)komplexek oldatbeli szerkezete jól vizsgálható az egyensúlyi rendszerben felvett pH-függő ESR spektrumsorozatok segítségével, amely kiegészíthető további szerkezeti információk gyűjtésével megfagyasztott oldatban. A röntgendiffrakciós és ESR módszer egyidejű alkalmazása a réz(II)komplexek szerkezetvizsgálatában lehetőséget nyújt az intramolekuláris és intermolekuláris kölcsönhatások mélyebb megértéséhez, és felfedhet olyan szerkezeti átalakulásokat, amelyek fontosak lehetnek mind a biológiai hatás kifejtésénél mind pedig a gyógyszer formulázás kialakításánál. Az előadásban néhány olyan példát mutatok be, ahol réz(II)bioligandum komplexekre ESR spektroszkópiai és egykristály röntgendiffrakciós eredmények is rendelkezésre állnak.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönjük az anyagi támogatást az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok OTKA 115762 pályázatának.

## Hétköznapi vaskomplexek - különleges reakciók

*Lente Gábor*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: [lenteg@science.unideb.hu](mailto:lenteg@science.unideb.hu)

Az előadás rövid betekintést ad azon tudományos eredményekbe, amelyeket a Debreceni Egyetem Környezatkémiai Reakciómechanizmusok Kutatócsoportja különböző vaskomplexek kinetikai tanulmányozásának eredményeként publikált az elmúlt húsz évben.

Az vizsgált részecskék közül a  $\text{Fe}_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_8^{4+}$ , a  $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$  és vas(III)ion egy vízzoldható porfirinnel képzett komplexe ( $\text{FeTPPS}^+$ ) mutatott olyan sajátosságokat, amelyek a korábbi irodalmi adatok ismeretében meglepőek voltak. A vas(III)ion hidrolízisének egyensúlya ugyan már nagyon régen jól ismert, arra azonban mégsem figyeltek fel korábban, hogy a oldatok sárga színét okozó dimer dihidroxokomplex csak a monomer formák szubsztitúciós reakcióihoz képest lassan képződik és bomlik. Így nagyobb,  $0,001 \text{ mol/dm}^3$ -t meghaladó fémkoncentrációk esetében a vas(III)ion reakcióinak kinetikai leírása igen összetetté válik, s rendszeresen számítani kell többmagvú, az UV-tartományban jelentős fényelnyelést mutató, néhány másodperc élettartamú köztitermékek keletkezésére is [1-6].

A  $\text{FeTPPS}^+$  katalizátorként használható peroxovegyületek oxidációs reakcióiban. Az ilyen folyamatok érdekessége, hogy kinetikai leírásuk során nem lehet eltekinteni a katalizátor gyűrűnyílásos oxidációjától. Az oxidálható anyag jelenléte a ezzel versengő reakciótut nyit meg, így jelentősen megnöveli a katalizátor hasznos élettartamát [7-8]. A vas(II) hexakvakomplexe ének  $\text{HSO}_5^-$ -os oxidációja többlépéses folyamat, ami igen meglepő kísérleti tapasztalat volt, de értelmezése végül viszonylag egyszerűnek bizonyult [9].

[1] G. Lente, I. Fábián, *Inorg. Chem.*, **1998**, *37*, 4204.

[2] G. Lente, I. Fábián, *Inorg. Chem.*, **1999**, *38*, 603.

[3] G. Lente, M. E. A. Magalhaes, I. Fábián, *Inorg. Chem.*, **2000**, *39*, 1950.

[4] G. Lente, I. Fábián, *Reac. Kinet. Catal. Lett.*, **2001**, *73*, 117.

[5] G. Lente, I. Fábián, *Inorg. Chem.*, **2002**, *41*, 1306.

[6] I. Kerezsi, G. Lente, I. Fábián, *Dalton Trans.*, **2004**, 342.

[7] G. Lente, J. H. Espenson, *Inter. J. Chem. Kinet.*, **2004**, *36*, 449.

[8] G. Lente, I. Fábián, *Dalton Trans.*, **2007**, 4268.

[9] G. Lente, J. Kalmár, Z. Baranyai, A. Kun, I. Kék, D. Bajusz, M. Takács, L. Veres, I. Fábián, *Inorg. Chem.*, **2009**, *48*, 1763.

## **Látható fény hasznosítása vízdoldható metallo-porfirinekkel**

*Horváth Ottó, Fodor Melinda Anna, Major Máté Miklós, Valicsek Zsolt,  
Muhammad Imran, Kiss Melitta Patrícia, Fodor Lajos, Günter Grampp, Alexander  
Wankmüller*

Pannon Egyetem, Veszprém

A fém-porfirinek – speciális fényelnyelő, koordinációs és redoxi sajátosságuk révén – alapvető fontosságúak a természetben, s mesterséges rendszerekben is jól alkalmazhatók.

Előnyös spektrális tulajdonságaik és gerjesztett állapotaik reakciói jelentősen függenek szerkezeti felépítésüktől.

Látható tartományú sugárzás hasznosítására vízdoldható porfirin-komplexek fotofizikai és -kémiai viselkedését vizsgáltuk - mind kinetikailag inert normál, mind labilis síkon kívüli szerkezetűek esetében. E koordinációs vegyületek környezetbarát fotokatalitikus eljárások alapjául szolgálhatnak.

## Dimer vagy monomer? $^{203/205}\text{Tl}$ NMR homo- és heteronukleáris spin-spin csatolások heteropolimetallátok oldataiban

*Fodor Tamás<sup>a</sup>, Ayass W. W.<sup>b</sup>, Zékány László<sup>a</sup>, Bodor Andrea<sup>c</sup>, Kortz U.<sup>b</sup>, Tóth Imre<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Jacobs University, Bremen, Germany

<sup>c</sup> Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

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

A tallium a periódusos rendszer szinte elfelejtett eleme, pedig NMR paraméterei szinte ideálisak. Két természetes izotópja van:  $^{203}\text{Tl}$  (29,5 %) és  $^{205}\text{Tl}$  (70,5 %), mindkettő  $I = \frac{1}{2}$ , abszolút intenzitásaik ( $^1\text{H} = 1,00$ ) rendre 0,055 és 0,13. Általában  $^{205}\text{Tl}$  NMR spektrumokat veszünk fel, ha a molekulánkban csak egy Tl-atom van, ehhez szelektív mérőfej kell, mert a szokásos BB-fejek nem hangolhatók a kívánt, a  $^{31}\text{P}$ -nál jóval magasabb frekvenciára. Kevésbé módos laborokban, ilyen pl. a miénk is, egy trükkal lehet  $^{203/205}\text{Tl}$  NMR-t mérni: az 500 MHz-es (11,7467 T) készülék BBO mérőfejét tesszük a 360 MHz-es (8,459 T) mágnesbe, ami már hangolható 207,75 vagy 205,72 MHz-re, ami a  $^{205}\text{Tl}$  ill. a  $^{203}\text{Tl}$  NMR frekvenciája. Hasonló módon az ELTE 250 MHz-es készülékén egy 400 MHz-es BBO fejjel lehet ezt eljátszani. Természetesen így sem  $^1\text{H}$ -lecsatolás, sem  $^2\text{D}$  lock nem áll rendelkezésre.

Az előadásban azt tervezzük megmutatni, hogy két Tl-atomot tartalmazó molekulák esetében mennyire előnyös megmérni és összehasonlítani azok  $^{205}\text{Tl}$  és  $^{203}\text{Tl}$  spektrumait. Két új, tallium-tartamú polioxometallát mindegyikében két  $\text{Tl}^{3+}$ -ion köt össze két (hiányos, lacunary) heteropolimetallát részt, így  $\{\text{Tl}_2(\text{SiW}_8)_2\}$  ill.  $\{\text{Tl}_2(\text{P}_2\text{W}_{15})_2\}$  összetételű dimer szerkezetek azonosíthatóak szilárd fázisban Röntgen-kristallográfias módszerrel. Az NMR spektrumok kétséget kizáróan mutatják, hogy a dimer szerkezet stabilan megmarad oldatban is.

**Köszönetnyilvánítás:** A munkát anyagilag az (OTKA K-109029), a German Academic Exchange Council (DAAD) és a Jacobs University támogatta.

**Mi köze a hangyának (*formica rufa*) a mágneses képalkotáshoz? –  
a *cisz,mer*-[IrH<sub>2</sub>Cl(*mtppps*)<sub>3</sub>] komplex katalitikus tulajdonságai vizes  
oldatokban**

*Papp Gábor*<sup>a</sup>, *Ölveti Gábor*<sup>b</sup>, *Horváth Henrietta*<sup>a</sup>, *Kathó Ágnes*<sup>b</sup>, *Joó Ferenc*<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1. – 4002  
Debrecen, Pf. 400.

e-mail: papp.gabor@science.unideb.hu

A hangyasav az egyik alkalmazhatónak tartott hidrogén tárolási technológia lehetséges munkanyaga<sup>[1]</sup>. Megfelelő körülmények között bontásával H<sub>2</sub> és CO<sub>2</sub> képződik, melyből a hidrogén (a CO<sub>2</sub>-től való elválasztás után) üzemanyagcellákban elektromos energiává alakítható - melléktermékként H<sub>2</sub>O képződik. Léteznek igen aktív homogén<sup>[2]</sup> és heterogén<sup>[3]</sup> katalizátorok melyek alkalmasak a HCOOH bontására, azonban számos esetben valamilyen adalékanyag szükséges ezekhez a katalitikus folyamatokhoz.

Eddigi méréseinkkel igazoltuk, hogy vizes oldatokban a *cisz,mer*-[IrH<sub>2</sub>Cl(*mtppps*)<sub>3</sub>]-komplex (*mtppps* = *meta*-szulfonátófenil-difenilfoszfin-Na sója) igen aktívan bontja a hangyasavat, H<sub>2</sub>:CO<sub>2</sub>=1:1 gázelegy képződése közben. Zárt rendszerben (Parr<sup>®</sup>-reaktor) megvalósítva a bontást 298 320 óránkénti katalitikus ciklusszámot sikerült elérnünk (140 bar végnyomás mellett), mely jelenleg a világon az ebben a katalitikus folyamatban elért második legnagyobb aktivitás. Igazoltuk többek között a katalizátor stabilitását is - öt egymás utáni ciklusban megvalósítva a reakciót ugyanazon katalizátor oldat aktivitás csökkenés nélkül bontotta a HCOOH-at.

A *cisz,mer*-[IrH<sub>2</sub>Cl(*mtppps*)<sub>3</sub>] aktívnek bizonyult vizes közegű *para*-hidrogénezési reakciókban is, melyek a modern orvosdiagnosztikában – MRI – játszhatnak meghatározó szerepet.

[1] S. Enthaler, J. v. Langermann, T. Schmidt, *Energy Environ. Sci.*, **2010**, 3, 1207

[2] M. Iguchi, Y. Himeda, Y. Manaka, K. Matsuoka, H. Kawanami, *ChemCatChem*, **2016**, 8, 886

[3] Q. Liu, X. Yang, Y. Huang, S. Xu, X. Su, X. Pan, J. Xu, A. Wang, C. Liang, X. Wang, T. Zhang, *Energy Environ. Sci.*, **2015**, 8, 3204

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA-NKFIH K101372 és NKFI-1 PD115535 támogatásával valósult meg.

## Új eredmények az arzénessav-tiolát kölcsönhatásban

*Szekeres Levente István<sup>a</sup>, Jancsó Attila<sup>a</sup>, Gyurcsik Béla<sup>a</sup>, Kiss Tamás<sup>a,b</sup>, Kele Zoltán<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

<sup>b</sup> MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport

<sup>c</sup> Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytani intézet

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

Az arzénessav vízkilépéssel kísért kondenzációs reakcióban képes kötéseket kialakítani tiol vegyületekkel. A legerősebb kölcsönhatás vicinális ditiolokkal figyelhető meg, mint például a BAL (2,3-dimierkaptopropán-1-ol) kelátor. Noha a ditiolok funkciós csoportjainak távolsága és a koordináció erőssége között többféle lehetséges összefüggést is publikáltak, koordinációs kémiai szempontból még számos kérdés megválaszolatlan. Többek között a különböző összetételű arzénessav-BAL rendszerek egyensúlyi speciációja sincs közölve a szakirodalomban, így a képződő részecskék összetételének, stabilitásának és szerkezetének felderítése érdekében UV-spektroszkópiát, 1D-, 2D-<sup>1</sup>H-NMR, MS technikákat és ab initio elméleti számításokat alkalmaztunk. Eredményeink alapján As(LH<sub>-1</sub>), As(OH)L, As<sub>2</sub>L<sub>3</sub> és As(HL)L összetételű részecskék jelenlétét javasoljuk, melyekben a tiolcsoportok mellett a ditioeritritolhoz hasonlóan, az alkoholos hidroxilcsoport részvételével is kialakulhat kölcsönhatás.[1] A kizárólag tiolátcsoportok kötődése révén kialakuló öttagú kelátgyűrűs monokomplexekben geometriai izomereket is megkülönböztethetünk, mivel lassú az arzénhez kötődő hidroxilcsoport inverziója.

Bár a monotiol vegyületek önmagukban jóval kisebb stabilitású komplexeket képeznek arzénessavval, ditiolok előzetes koordinációja a fennmaradó kötőhelyek betöltődését kedvezőbbé teheti. Ezzel összhangban, a kétféle ligandumot is tartalmazó rendszerekben elsősorban terner komplexek dominanciáját tapasztaltuk. A legelfogadottabb model szerint az arzénessav citotoxicitását a szervezetben levő tioltartalmú biomolekulákhoz történő megkötődés révén fejti ki. Feltételezhető, hogy az As(III)-ditiol monokomplexek Cys oldalláncokhoz történő erősebb koordinációja okozza, hogy a ditiol vegyületek kis koncentrációban növelik az arzénessav toxicitását.[2]

[1] A. Kolozsi, A. Lakatos, G. Galbács, A.Ø. Madsen, E. Larsen, B. Gyurcsik, *Inorg. Chem.* **2008**, 47, 3832

[2] K.-Y. Jan, T.-C. Wang, B. Ramanathan, J.-R. Gurr; *Toxicological Sciences* **2006**, 90, 432

## Allil-alkoholok redox izomerizációja foszfa-urotropint tartalmazó félszendvics Ru(II)-katalizátorokkal

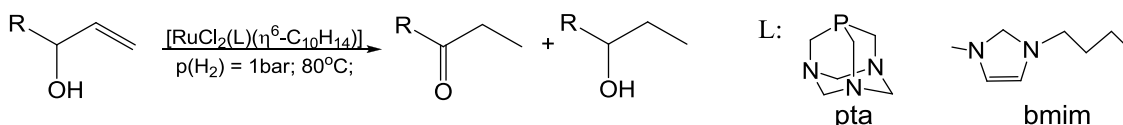
*Bolyog-Nagy Evelin<sup>a</sup>, Udvardy Antal<sup>b</sup>, Barczáné Bertók Ágnes<sup>a</sup>, Joó Ferenc<sup>a,b</sup>, Kathó Ágnes<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

e-mail: nagyevelin88@gmail.com

Kutatócsoportunkban már korábban tanulmányoztuk az allil-alkoholok redox izomerizációját H<sub>2</sub> jelenlétében oly módon, hogy katalizátorként a [RuCl<sub>2</sub>(bmim)(η<sup>6</sup>-C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>)] (**1**, bmim=*l*-butil-3-metilimidazol-2-ildén) komplexet használtuk különböző pH-jú puffer oldatokban [1]. Semleges oldatokban a telített alkoholok mennyisége kb. hatoda az izomerizáció révén képződő ketonoknak, azonban a [RuCl(bmim)(pta)(η<sup>6</sup>-C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>)]<sup>+</sup> (**2**, pta = 1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán) által katalizált reakciókban nő a keton/telített alkohol arány.



Ezzel szemben azt találtuk, hogy [RuCl<sub>2</sub>(pta)(η<sup>6</sup>-C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>)] (**3**) katalizátorral az 1-oktén-3-ol reakciója ugyan kb. kétszer gyorsabb, mint **1** esetén, a szelektivitásban azonban nincs különbség. H<sub>2</sub> távollétében csak pH ≥ 10 puffer oldatban észleltünk átalakulást, melynek kizárólagos terméke az oktan-3-on. Ugyanezt tapasztalták akkor is, amikor a [RuCl<sub>2</sub>(pta)(η<sup>6</sup>-C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>)]-t (**3**) puffer helyett két ekv. Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>-t is tartalmazó vizes oldatba mérték be [2], viszont a kísérlet megismérlésekor eltérő konverziókat kaptunk a reagensek hozzáadásának sorrendjétől és/vagy idejétől függően. Felfigyeltünk azonban a vizes oldat színváltozására, és az azt előidéző folyamatot UV-vis és <sup>31</sup>P-NMR spektrumok alapján időben is követtük. Megállapítottuk, hogy Cs- vagy Na-karbonát hatására [Ru(η<sup>2</sup>-O<sub>2</sub>CO)(η<sup>6</sup>-C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>)(pta)] (**4**) képződik, melyet egykristályként is elkülönítettünk, és röntgendiffrakciós módszerrel meghatároztuk szilárd fázisú molekulaszervezetét. E komplex vizes oldata (pH=7,24) bázis hozzáadása nélkül is képes izomerizálni az allil-alkoholokat, ezért különösen hasznos lehet lúgérzékeny szubsztrátumok esetén.

[1] P. Csabai, F. Joó, *Organometallics* **2004**, *23*, 5640

[2] P. Servin, R. Laurent, L. Gonsalvi, M. Tristany, M. Peruzzini, J.P. Majoral, A.-M. Caminade, *Dalton Trans.* **2009**, 4432

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA-NKFIH (K 101372) anyagi támogatásával valósult meg.



## Deuterálás, éter- és észterképzés $[\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ katalizátorral

*Forgács Viktória<sup>b</sup>, Horváth Henrietta<sup>a</sup>, Papp Gábor<sup>a</sup>, Kathó Ágnes<sup>b</sup>, Joó Ferenc<sup>a,b</sup>*

<sup>a</sup> MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

e-mail: vikta91@gmail.com

A különböző éter- és észterképzési reakciók legtöbb esetben adalékanyag (sav, bázis, oldószer) alkalmazásával mennek végbe, erélyes körülmények között.

Munkánk során  $[\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{tos})_2$  mint katalizátor prekursor és kelátképző foszfinligandumot tartalmazó rendszerek katalitikus aktivitását tanulmányoztuk O-H kötés aktiválásában, melynek során alkoholokból kondenzációs reakciókban éterek, míg karbonsavakkal észterek képződtek, enyhe körülmények között, oldószermentes közegben. Éterek, észterek kinyerésének lehetőségét, a reakció körülményeinek optimalizálását vizsgáltuk modellvegyületek segítségével.

Továbbá ugyanezen katalizátor rendszer éter- és észterképzés mellett deuterált oldószerek vagy deutérium forrás jelenlétében szelektíven a funkciós csoporthoz képest alfa helyzetben lévő CH csoportokon katalizálja a H/D cserét<sup>[1]</sup>. Munkám során tanulmányoztam a C-H aktiválás ezen formáját is.

[1] Horváth Henrietta, Papp Gábor, Laurenczy Gábor, Joó Ferenc

*Eljárás vegyületek C-H kötésének aktiválására és az azt szolgáló reakciórendszer*

*Patent ID: WO2014006433A2, 2014*

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA (K 101372) és a Tudományos Diákköri műhelyek a Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Karán (NTP-HHTDK-15-0047) című pályázat támogatásával valósult meg.

## Hidrogén akkumulátor-hidrogén tárolása Ir-NHC-foszfín komplexekkel vizes közegben

*Horváth Henrietta<sup>a</sup>, Papp Gábor<sup>a</sup>, Kovács Henrietta<sup>b</sup>, Kathó Ágnes<sup>b</sup>, Joó Ferenc<sup>a,b</sup>*

<sup>a</sup> MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémia Tanszék, 4032 Debrecen Egyetem tér 1.

e-mail: henrietta.horvath@science.unideb.hu

A társadalom egyre növekvő energiaigénye miatt az újrafelhasználható energiaforrások problémakörének egyik fontos megoldandó kérdése a hidrogén termelése és tárolása.

Új, vízdoldható Ir-NHC-foszfín komplexeket [1] teszteltünk a formiát bontás és bikarbonát redukciójában [2,3], mely ennek a problémakörnek egy lehetséges megvalósulási formája. Az említett katalizátoroknak igen fontos jellemzője, hogy a folyamatot mindkét irányban katalizálják.

A formiát bontás, hidrogénkarbonát redukciójának atmoszférikus ill. nagy nyomáson, nyitott és zárt rendszerben történő tanulmányozásán túlmenően H-Cube, folyamatos áramlású mikroreaktorban is vizsgáltuk a formiát bontás folyamatát, vizes közegű homogénkatalitikus reakcióban.



Ábra: Hidrogén akkumulátor elvi megvalósítása

[1] H. Horváth, Á. Kathó, A. Udvardy, G. Papp, D. Szikszai, F. Joó, *Organometallics* **2014**, *33*, 6330-6340

[2] H. Horváth, G. Papp, R. Szabolcsi, Á. Kathó, F. Joó, *ChemSusChem* **2015**, *8*, 3036 – 3038

[3] H. Horváth, G. Papp, F. Joó, Á. Kathó: *Hung. Pat. Appl.* HU1300539; WO 2015/040440A2, **2013**  
Formiát bontás/HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> redukció mint hidrogén fejlesztés és tárolás Ir-NHC-foszfín komplexekkel  
(*Formate decomposition/HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> reduction as chemical hydrogen generation and storage by Ir-NHC-phosphine complexes*)

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA-NKFIH K101372 és NKFI-1 PD115535 támogatásával valósult meg.

## A humán prion fehérje 103-112 fragmense és a Cu(II)-ion közötti kölcsönhatás vizsgálata – koordináció és oxidáció

*Csire Gizella<sup>a</sup>, Kállay Csilla<sup>b</sup>, Nagy Lajos<sup>c</sup>, Várnagy Katalin<sup>a</sup>, Sóvágó Imre<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

<sup>c</sup> Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

e-mail: csire.gizella@scinece.unideb.hu

A fémion-katalizált oxidáció (MCO) a biomolekulák károsodásához vezet és ez szerepet játszik az oxidatív stresszben, a biológiai öregedésben és különböző idegrendszeri megbetegedésekben is, úgymint a Parkinson vagy az Alzheimer kór [1]. A fehérjékben oxidációra érzékeny aminosavak vannak, ilyen a hisztidin és a metionin. A hisztidin oxidációjakor elsődlegesen 2-oxo-hisztidin [2], míg a metionin oxidációjakor metionin-szulfoxid, erélyesebb körülmények között pedig metionin-szulfon keletkezik [3].

A humán prion fehérje 103-112 fragmensének (Ac-SerLysProLysThrAsnMetLysHisMet-NH<sub>2</sub>, Ac-SKPKTNMKHM-NH<sub>2</sub>) és mutánsainak (Ac-SKPKTNAKHA-NH<sub>2</sub>, Ac-SKPKTNAKHM-NH<sub>2</sub>, Ac-SKPKTNMKHA-NH<sub>2</sub>, Ac-MKPKTNAKHA-NH<sub>2</sub>) réz(II)ion jelenlétében történő oxidációját vizsgáltuk. A választott ligandumok Cu(II)-komplexeinek összetételét és szerkezetét pH-potenciometriával, UV-látható és CD spektroszkópiával határoztuk meg. Az oxidáció során keletkező termékek minőségi analizisére HPLC-ESI-MS és ESI-MS/MS technikát használtunk.

Ezekkel a ligandumokkal csak egymagvú komplexek keletkeznek Cu(II)-ion jelenlétében. Az oxidációhoz választott pH-n (7,4) [N<sup>-</sup>, N<sup>-</sup>, Im(N)] és [N<sup>-</sup>, N<sup>-</sup>, N<sup>-</sup>, Im(N)] koordinációs módú komplexek vannak jelen. Oxidálószerként a Cu(II)/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> rendszert használtuk. A csak hisztidint tartalmazó mutáns oxidációja során a peptidlánc hasadása következett be, míg a metionin-tartalmú peptideknél a metionin-oldallánc(ok) oxidálódtak.

A vizsgálataink során megállapítottuk, hogy a metionin oldalláncoknak védő szerepe van, jelenlétük megakadályozza a peptidlánc hasadását. Csak a metionin oldallánc reverzibilis, szulfoxidá történő oxidációja következik be.

[1] Stadtman ER, Berlett BS *Drug Metab Rev*, **1998**, *30*, 225–243

[2] Kowalik-Jankowska T, Ruta M, Wisniewska K, Lankiewicz L, Dyba M, *J Inorg Biochem* **2004**, *98*, 940–950

[3] Hoshi T, Heinemann S, *J Physiol (London)* **2001**, *531*, 1–11

**Köszönetnyilvánítás:** A munka az Országos Tudományos Kutatási Alapprogram (OTKA K 115480) keretében valósult meg.

## Királis *N*-donor ligandumot tartalmazó réz-, és mangánkomplexek vizsgálata

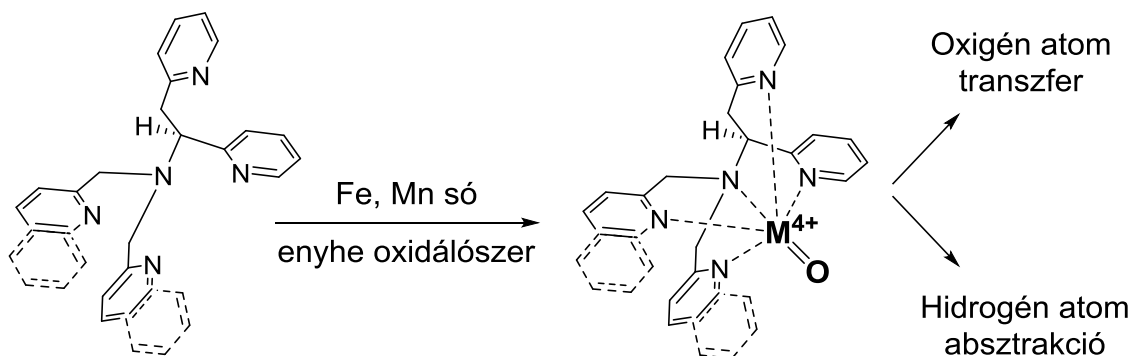
*Csonka Róbert, Kaizer József, Speier Gábor*

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

e-mail: rsonka@almos.uni-pannon.hu

Bizonyos nemhem típusú aktív centrumot tartalmazó dioxigenázok (HPP, TauD) oxidázok, (ACCO) vagy hidroxilázok (TyrH) biokémiai folyamataik során magas oxidációs fokú fém-oxigén intermediereket alakítanak ki. Ezek az állapotok olyan kémiai átalakulásokat segítenek, mint például olefinek, alkoholok oxidációja, aromás vegyületek *N*-dealkilezése, vagy egyszerű szénhidrogének C-H aktiválása. [1] Többnyire vas komplexek képesek a fenti reakciókat katalizálni, azonban az elmúlt években mangántartalmú analógjaiknál is tapasztaltak hasonló tulajdonságokat. [2]

Nemrég csoportunknak ötfogú, királis *N*-donor ligandumok sorozatát sikerült előállítani, amelyek már szobahőmérsékleten képesek különböző átmenetifém-ionokat magas oxidációs fokú állapotban megtartani hosszabb ideig. Célul tűztük ki hasonló kémiai környezetben elkészített  $\text{Cu}^{\text{I}}$ ,  $\text{Cu}^{\text{II}}$  és  $\text{Mn}^{\text{II}}$  komplexek vizsgálatát, a belőlük generált intermedierek azonosítását és leírását, valamint eltérő viselkedésük magyarázatát.



[1] P. C. A. Bruijninx, G. van Koten, R. J. M. Klein-Gebbink, *Chem. Soc. Rev.*, **2008**, 37, 2716.

[2] X. Wu, M. S. Seo, K. M. Davis, Y.-M. Lee, J. Chen, K.-B. Cho, Y. N. Pushkar, W. Nam, *J. Am. Chem. Soc.*, **2011**, 133, 20088.

**Köszönetnyilvánítás:** OTKA K108489, Bólyai János Kutatási Ösztöndíj (Csonka R.)

## Cinkujj-alapú mesterséges metallonukleázok szabályozásának lehetőségei

*Gyurcsik Béla<sup>a</sup>, Németh Eszter<sup>a</sup>, Czene Anikó<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> MTA-SzTE Bioszeretlen Kémiai Kutatócsoport

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

A mesterséges nukleázok jövőbeni terápiás alkalmazásához alapvető, hogy ezek az enzimek még a sejten belüli esetleges részleges lebomlásuk után se végezzenek nonspecifikus hasításokat, végzetes génhibákat eredményezve. A jelenleg alkalmazott cinkujj, TALE nukleáz vagy CRISPR/Cas rendszerekkel bízható eredményeket értek el, ám minden előnyük ellenére sem nyújtanak megoldást a fenti problémára [1].

A természetes nukleáz enzimek a legtöbb esetben szabályozott módon működnek. Ennek mintájára kutatócsoportunk egy új nukleáz domén tanulmányozását és katalitikus központként történő alkalmazását tűzte ki célul. A HNH nukleáz család egyik tagja a colicin E7 bakteriális toxin. A fehérje nukleáz doménjét, illetve mutált változatait vizsgálva kiderült, hogy a katalitikus C-terminális rész aktivitásának kifejtéséhez az N-terminális rész jelenléte is szükséges [2,3]. Kísérleteink során feltérképeztük a fehérjeszerkezet és fémkötés, valamint nukleáz aktivitás összefüggéseit, mikrokalorimetriás titrálásokat, cirkuláris dikroizmus spektroszkópiát, gél-elektroforézist, valamint röntgen-diffrakciós módszert alkalmazva.

A fenti eredmények alapján olyan mesterséges nukleázokat sikerült terveznünk és előállítanunk, melyekben az NCoIE7 kiválasztott C-, és N-terminális részletei közé specifikus DNS szekvenciát felismerő cinkujj fehérjét építettünk be [4]. Az új enzimek további optimalizálás révén alkalmasak lehetnek szabályozott génmódosítások kivitelezésére.

[1] Kim, H.; Kim, J.S. *Nat. Rev. Genet.* **2014**, *15*, 321.

[2] Czene, A.; Tóth, E.; Németh, E.; Otten, H.; Poulsen, J.C.; Christensen, H.E.; Rulíšek, L.; Nagata, K.; Larsen, S.; Gyurcsik, B. *Metallomics* **2014**, *6*, 2090.

[3] Németh, E.; Körtvélyesi, T.; Kožíšek, M.; Thulstrup, P.W.; Christensen, H.E.M.; Asaka, M.N.; Nagata, K.; Gyurcsik, B. *J. Biol. Inorg. Chem.* **2014**, *19*, 1295.

[4] Németh, E.; Schilli, G.K.; Nagy, G.; Hasenhindl, C.; Gyurcsik, B.; Oostenbrink, C. *J. Comput. Aided Mol. Des.* **2014**, *28*, 841.

**Köszönetnyilvánítás:** A projektet támogatták: OTKA-NKTH CK80850, MTA-JSPS (JSPS/127), TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 'Nemzeti Kiválóság Program'

## **Cinkujj-alapú mesterséges metallonukleázok funkcionális szerkezete**

*Fábián Zita<sup>a</sup>, Németh Eszter<sup>b</sup>, Gyurcsik Béla<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> MTA-SZTE, Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport

e-mail: fabianzit@gmail.com

A mesterséges nukleázok olyan enzimek, melyek segítségével egy tetszőlegesen kiválasztott DNS szekvencia hasítható el hidrolitikus módon. Egy ilyen enzim felhasználható a sejtekben a DNS molekulák megváltoztatására, hibás DNS szekvencia javítására. A nukleáz által elhasított DNS-t felismerve ugyanis működésbe lépnek a sejtek DNS-javító mechanizmusai a sérült DNS helyreállítása céljából. Egy alkalmas templát jelenlétében az ún. homológ rekombináció segítségével ily módon az eredetileg hibás DNS szekvencia helyére a helyes kód kerül. Ezzel az eljárással genetikai betegségeket lehetne a jövőben gyógyítani.

Kutatócsoportunk az elmúlt években a fentiek szerint próbált meg terápiás felhasználásra is alkalmas, biztonságos szabályozási mechanizmussal rendelkező mesterséges nukleázt kifejleszteni. A megtervezett fehérjék alapjául a cinkiont tartalmazó Colicin E7 nukleáz doménje (NColE7) szolgált, melynek katalitikus és szabályozó, C-, illetve N-terminális szegmenseit linker szekvenciákon keresztül egy három cinkujjból álló – a kiválasztott specifikus DNS szekvencia felismerését szolgáló – fehérje két végéhez kapcsoltuk [1]. Különböző hosszúságú NColE7 szegmenseket felhasználva, három mesterséges nukleáz molekulát alakítottunk ki, melyek oldatbeli szerkezetét, illetve Zn(II)-ionokkal és DNS-sel kialakuló kölcsönhatásait cirkuláris dikroizmus spektroszkópia segítségével vizsgáltuk. Annak érdekében, hogy minél átfogóbb képet kaphassunk a szerkezetben bekövetkező változásokról, vizsgálataink során a nukleázok cinkujj részletéhez specifikusan, illetve nem-specifikusan kötődő DNS-t egyaránt alkalmaztunk. Eredményeink azt mutatják, hogy a DNS-kötés hatására a másodlagos szerkezeti összetétel nem változik szignifikáns mértékben, ezért a továbbiakban a katalitikus és szabályozó egység térbeli távolságának megállapítására fluoreszcencia spektroszkópiás vizsgálatokat tervezünk.

[1] E. Németh, G.K. Schilli, G. Nagy, C. Hasenhindl, B. Gyurcsik, C. Oostenbrink, *J. Comp-Aid. Mol. Des.*, **2014**, 28, 841–850

**Köszönetnyilvánítás:** F.Z. egyhónapos dániai tanulmányútját a Campus Hungary Ösztöndíj támogatta.

## Félszendvics szerkezetű platinafémionok kölcsönhatása primer és szekunder monohidroxámsavakkal

*Parajdi-Losonczy Péter László<sup>a</sup>, Bényei Attila<sup>b</sup>, Godó Attila<sup>a</sup>, Mikó Diána<sup>a</sup>, Horváth Anita<sup>a</sup>, Farkas Etelka<sup>a</sup>, Brian Duff<sup>c,d</sup>, Denise A. Egan<sup>c,d</sup>, Buglyó Péter<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

<sup>c</sup> Centre for Pharmaceutical Research and Development, Institute of Technology Tallaght, Dublin, Ireland

<sup>d</sup> Department of Science, Institute of Technology Tallaght, Dublin, Ireland  
e-mail: parajdip@science.unideb.hu

Kutatócsoportunkban az utóbbi években behatóan vizsgáltuk a félszendvics platinafémionok koordinációs kémiáját. Ezeket a vegyületeket potenciálisan rákellenes szerekként tartják számon, és mivel ismert egyes hidroxámsavak daganatellenes hatása is, ezért e két vegyületcsalád kombinációjával talán hatékonyabb rákellenes szerekekhez juthatunk.

A vizsgált fémionok a  $[(\eta^6\text{-}p\text{-cimol})\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ , a  $[(\eta^6\text{-}p\text{-cimol})\text{Os}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ , a  $[(\eta^5\text{-Cp}^*)\text{Rh}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$  és a  $[(\eta^5\text{-Cp}^*)\text{Ir}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$  voltak. Az oldategyensúlyi vizsgálatok során az N-metil-acetohidroxámsavval való komplexképződésüket tanulmányoztuk [1], melynek során azt tapasztaltuk, hogy a ligandum a ruténium- és ródiumiont hatékonyan képes megkötni még a fiziológias pH-n is, ugyanakkor az ozmium- és főleg az irídiumion esetében itt már a fémion jelentős hidrolízisével kell számolni. A ruténium- és ozmiumion esetén a különféle szekunder monohidroxámsavval képződő komplexeket szilárd formában is előállítottuk [2]. Több komplex rákos sejteken történő biológiai tesztjére is sor került, azonban ezek nem mutattak biológiai aktivitást a vizsgált koncentráció tartományban. A legutóbbi időkben egy primer hidroxámsavval, az acetohidroxámsavval is vizsgálatokat kezdtünk, melynek során oldatfázisban vizsgáltuk a kölcsönhatását a félszendvics típusú ruténiumionnal. A ligandum eltérő szerkezetével összhangban eltérő jellegű kölcsönhatást tapasztaltunk a szekunder hidroxámsavakhoz képest, ugyanakkor a rendszerben lejátszódó folyamatok pontos leírása még további vizsgálatokat igényel. Az eredményeket fogja az előadás bemutatni.

[1] P. Buglyó, E. Farkas, *Dalton Trans.*, **2009**, 8063-8070.

[2] A.J. Godó, A.Cs. Bényei, B. Duff, D.A. Egan, P. Buglyó, *RSC Advances*, **2012**, 2, 1486–1495.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönettel tartozunk az OTKA (K112317) által nyújtott anyagi támogatásért. A szerzők köszönetet mondanak a COST Action CM1105 résztvevőinek az értékes diskusszióikért.

## A cisztein hatása hisztidint is tartalmazó peptidek átmenetifém komplexeiben

*Lihi Norbert<sup>a</sup>, Raics Mária<sup>a</sup>, Daniele Sanna<sup>b</sup>, Várnagy Katalin<sup>a</sup>, Sóvágó Imre<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen, Magyarország

<sup>b</sup> Istituto CNR di Chimica Biomolecolare, U. O. S. Sassari, Olaszország

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

A hisztidin és cisztein aminosavak erősen koordinálódó oldalláncai a fémionok leggyakoribb kötőhelyei. Ezen oknál fogva már széles körben vizsgálták a hisztidin komplexképző sajátságait különböző multihisztidin peptidekben, illetve a képződő komplexek lehetséges szerepét neurodegeneratív megbetegedésekben<sup>1-4</sup>. A ciszteint tartalmazó peptidek komplexképző sajátsága ugyanakkor kevésbé vizsgált, a legfontosabb tanulmányok a *Helicobacter pylori* baktérium nikkell homeosztázisához, illetve a cink transzporter és cink ujj fehérjékhez kötődnek.

A Debreceni Egyetem Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoportjában szisztematikus vizsgálatokat folytatunk hisztidint és ciszteint egyaránt tartalmazó peptidek komplexképző sajátságainak megismerése céljából<sup>5,6</sup>. Vizsgálataink során klasszikus oldategyensúlyi (pH-potenciometria) és spektroszkópai (UV/Vis, CD, NMR, ESR és MS), valamint egyes esetekben elméleti kémiai (DFT) módszereket alkalmazunk. Az eredmények alapján képet kaphatunk a képződő komplexek termodinamikai és szerkezeti sajátságairól, illetve a fémionok donoratom preferenciájáról.

Az előadás során bemutatjuk két szabad N-terminális aminocsoportot tartalmazó hexapeptid (AHAAAC-NH<sub>2</sub> és AAHAAC-NH<sub>2</sub>) komplexképző sajátságát réz(II)-, nikkell(II)-, cink(II)-, palládium(II)- és kadmium(II)ionokkal.

[1] H. Kozłowski, W. Bal, M. Dyba, T. Kowalik-Jankowska, *Coord. Chem. Rev.*, 1999, 184, 319.

[2] I. Sóvágó, C. Kállay, K. Várnagy, *Coord. Chem. Rev.*, 2012, 256, 2225.

[3] G. Arena, G. Pappalardo, I. Sóvágó, E. Rizzarelli, *Coord. Chem. Rev.*, 2012, 256, 3.

[4] G. Arena, D. La Mendola, G. Pappalardo, I. Sóvágó, E. Rizzarelli, 2012, 256, 2202.

[5] N. Lihi, Á. Grenács, S. Timári, I. Turi, I. Bányai, I. Sóvágó, K. Várnagy, *New. J. Chem.*, 2015, 39, 8364.

[6] M. Raics, N. Lihi, A. Laskai, K. Várnagy, I. Sóvágó, *New. J. Chem.*, 2016, DOI:

10.1039/C6NJ00081A

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatást az NKFIH K 115480 azonosító számú pályázata és a Richter Gedeon Talentum Alapítvány támogatta.



# **Konferencia résztvevői**



név	intézmény	e-mail	előadás
Bihari Zsolt	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	bihari.zsolt@science.unideb.hu	
Bolyog-Nagy Evelin	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	nagyevelin88@gmail.com	<u>E38</u>
Bombicz Petra	MTA Természettudományi Kutatóközpont	bombicz.petra@ttk.mta.hu	<u>E31</u>
Buglyó Péter	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	buglyo@science.unideb.hu	<u>E12</u> , E45
Csire Gizella	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	csire.gizella@science.unideb.hu	<u>E41</u>
Csonka Róbert	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	rcsonka@almos.uni-pannon.hu	E9, E10, <u>E42</u>
Dancs Ágnes	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	dancsa@chem.u-szeged.hu	<u>E4</u>
Dömötör Orsolya	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	domotor.o@chem.u-szeged.hu	E23
Dudás Csilla	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	dudas.csilla@chem.u-szeged.hu	<u>E13</u>
Enyedy Éva Anna	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	enyedy@chem.u-szeged.hu	<u>E23</u>
Erdei Judit	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jutka.erdei@gmail.com	<u>E7</u>
Farkas Edit	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	farkas.edit@science.unideb.hu	<u>E16</u>
Farkas Etelka	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	efarkas@science.unideb.hu	E12, E45
Fábián István	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ifabian@science.unideb.hu	E19
Fábián Zita	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	fabianzit@gmail.com	<u>E44</u>
Fodor Tamás	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	fodor.tamas@science.unideb.hu	E3, E35
Forgács Viktória	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	vikta91@gmail.com	<u>E39</u>
Gajda Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tamas.gajda@chem.u-szeged.hu	E4, E5

## 50. Komplexkémiai Kollokvium

név	intézmény	e-mail	előadás
Garda Zoltán	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	garda.zoltan@science.unideb.hu	E1, <u>E3</u>
Gál Gyula Tamás	MTA Természettudományi Kutatóközpont	gal.tamas@ttk.mta.hu	
Grenács Ágnes	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	grenacs.agnes@science.unideb.hu	
Gyurcsik Béla	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	gyurcsik@chem.u-szeged.hu	E37, <u>E43</u> , E44
Horváth Henrietta	MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport	henrietta.horvath@science.unideb.hu	E36, E39, <u>E40</u>
Horváth Ottó	Pannon Egyetem, Általános és Szervetlen Kémia Tanszék	otto@vegic.uni-pannon.hu	E20, E26, <u>E34</u>
Irena Paczkowska	Institute of Biochemistry and Biophysics, Polish Academy of Sciences, Pawińskiego 5a, Warsaw, Poland	irena.paczkowska@wp.pl	
Jakusch Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jakusch@chem.u-szeged.hu	<u>E29</u>
Jancsó Attila	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jancso@chem.u-szeged.hu	E22, E37
Joó Ferenc	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	joo.ferenc@science.unideb.hu	E25, E36, E38-40
Kaizer József	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	kaizer@almos.vein.hu	E8-10, E42
Kalmár József	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kalmar.jozsef@science.unideb.hu	
Kathó Ágnes	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	katho.agnes@science.unideb.hu	E25, E36, E38-40
Kelemen Zsolt	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kelemen.zsolt@mail.bme.hu	<u>E11</u>
Kerekes Péter	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	kerekes0peter@gmail.com	E19
Kiss Melitta Patricia	Pannon Egyetem, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék	kiss.melitta.p@gmail.com	<u>E20</u> , E34
Kiss Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tkiss@chem.u-szeged.hu	E29, E37
Kutus Bence	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kutusb@chem.u-szeged.hu	E13, <u>E14</u> , E18

név	intézmény	e-mail	előadás
Lakk-Bogáth Dóra	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	lakkd@almos.uni-pannon.hu	<u>E9</u>
Lente Gábor	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	lente@science.unideb.hu	E19, <u>E33</u>
Lihi Norbert	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	lihi.norbert@science.unideb.hu	<u>E46</u>
Lorencz Noémi	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	lorencz.noemi@gmail.com	<u>E10</u>
Matyuska Ferenc	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	matfer@chem.u-szeged.hu	<u>E5</u>
May Nóra	MTA Természettudományi Kutatóközpont	may.nora@ttk.mta.hu	<u>E32</u>
May Zoltán	MTA Természettudományi Kutatóközpont	may.zoltan@ttk.mta.hu	
Mesterházy Edit	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	medit90@chem.u-szeged.hu	<u>E22</u>
Mező Gábor	MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport	gmezo@elte.hu	<u>E30</u>
Mészáros János Péter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	meszaros.janos.peter.1@gmail.com	E23
Molnár Enikő	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	molnar.eniko@science.unideb.hu	<u>E15</u>
Nyulászi László	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	nyulaszi@mail.bme.hu	E11, <u>E24</u>
Ósz Katalin	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	osz.katalin@science.unideb.hu	<u>E19</u>
Papp Gábor	MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport	papp.gabor@science.unideb.hu	<u>E36</u> , E39, E40
Parajdi-Losonczi Péter László	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	parajdip@science.unideb.hu	<u>E45</u>
Penke Botond	Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytani Intézet	penke.botond@med.u-szeged.hu	<u>E28</u>
Póta Kristóf	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	potakristof1992@gmail.com	<u>E2</u> , E3

## 50. Komplexkémiai Kollokvium

név	intézmény	e-mail	előadás
Sipos Pál	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	sipos@chem.u-szeged.hu	E13, E14, E18
Sóvágó Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	sovago@science.unideb.hu	<u>E27</u> , E41, E46
Speier Gábor	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	speier@almos.vein.hu	E8-10, E42
Szabó Mária	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szabo.maria@science.unideb.hu	
Szalontai Gábor	Pannon Egyetem, Kémiai Intézet, NMR laboratórium	Szalontai.Gabor@solidnmr.hu	<u>E21</u>
Szavuly Miklós István	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	miklos_szavuly@yahoo.com	<u>E8</u>
Szekeres Levente István	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	slevente@chem.u-szeged.hu	<u>E37</u>
Szigyártó Imola Csilla	MTA Természettudományi Kutatóközpont	szigyarto.imola.csilla@ttk.mta.hu	
Szorcsik Attila	MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport	szorcsik@chem.u-szeged.hu	E5
Szunyog Györgyi	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szunyog.gyorgyi@science.unideb.hu	<u>E6</u>
Szunyogh Dániel Mihály	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szunyogh@chem.u-szeged.hu	
Tircsó Gyula	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	gyula.tircso@science.unideb.hu	<u>E1</u> , E2, E3, E15
Tóth Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	imre.toth@science.unideb.hu	E1, E3, E16, E17, <u>E35</u>
Udvardy Antal	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	udvardya@unideb.hu	<u>E25</u> , E38
Valicsek Zsolt	Pannon Egyetem, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék	valicsek@almos.uni-pannon.hu	E20, <u>E26</u> , E34
Varga Norbert	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varganorbi0000@gmail.com	<u>E18</u>
Vágner Adrienn	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	vagner.adrienn@science.unideb.hu	<u>E17</u>
Várnagy Katalin	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varnagy.katalin@science.unideb.hu	E6, E7, E41, E46