

# **52. Komplexkémiái Kollokvium**

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

**2018. május 22-24., Balatonvilágos**



# **Részletes program**



**Elnök: Várnagy Katalin (DE)**

14.00 – 14.10 Megnyitó

14.10 – 14.30 Molnár Enikő, Tircsó Gyula (DE): **Merevvázú makrociklusos ligandumok Gd(III)-komplexei: egyensúly, relaxometria és bomláskinetika**  
**E1**

14.30 – 14.50 Tóth Csilla Noémi, Baranyai Edina, Harangi Sándor, Baranyai Zsolt, Fábíán István (DE): **Gadolinium alapú MRI kontrasztanyagot tartalmazó humán vészérum vizsgálata induktív csatolású plazma optikai emissziós spektrometriával**  
**E2**

14.50 – 15.10 Mészáros János P., Jelena M. Poljarević, Heiko Geisler, Veréb Fanni, May Nóra V., Wolfgang Kandioller, Bernhard K. Keppler, Enyedy Éva A. (SzTE): **Természetes eredetű (O,O) donoratomokat tartalmazó vegyületek félszendvics fémorganikus komplexeinek oldatkémiai vizsgálata**  
**E3**

15.10 – 15.30 Nagy Sándor, Farkas Etelka, Bényei Attila Csaba, Buglyó Péter (DE): **[Co<sup>III</sup>(NN)(NN)(OO)]<sup>2+</sup> összetételű komplexek előállítás és analitikai jellemzése**  
**E4**

15.30 – 15.50 Keszei Soma, Balogh Szabolcs, Nagy Livia, Skodáné Földes Rita, Lendvay György (PE): **Szenzorként alkalmazható ferrocén tartalmú karbamidszármazékok vizsgálata**  
**E5**

15.50 – 16.20 *Szünet*

**Elnök: Dömötör Orsolya (SzTE)**

16.20 – 16.40 Csupász Tibor, Váradí Balázs, Garda Zoltán, Baranyai Zsolt, Ghiani Simona, Maiocchi Alessandro, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **Nyíltláncú ligandumokkal képzett Mn<sup>2+</sup>-komplexek előállítása és koordinációs kémiai jellemzése**  
**E6**

16.40 – 17.00 Garda Zoltán, Molnár Enikő, Botár Richárd, Nagy Viktória, Baranyai Zsolt, Kovács Zoltán, Brücher Ernő, Kálmán Ferenc Krisztián, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **Ciklén-származékok Mn(II)-komplexeinek fizikai-kémiai tulajdonságai: egyensúly, relaxitás és bomláskinetika**  
**E7**

17.00 – 17.20 Váradí Balázs, Gogolák Réka Anna, Gáll Kitti, Bényei Attila Csaba, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **1,4,7-triazaciknononán és piklén-alapú bifunkciós ligandumok előállítása és komplexképző sajátosságai vizsgálata**  
**E8**

17.20 – 17.40 Sólyom Bernadett, Kripli Balázs, Kaizer József, Speier Gábor (PE): **Királis N-donor ligandumokat tartalmazó vas-, és mangántartalmú komplexek vizsgálata vizes rendszerekben**  
**E9**

17.40 – 18.00 Hajdu Bálint, Kiricsi M., Moncol J., Gyuresik B. (SzTE): **Kismolekulák és fehérjék kölcsönhatása DNS-sel fémionok jelenlétében**  
**E10**

18.00 – 18.20 Horváth Dávid, Baranyai Zsolt, Babinszkiné Farkas Edit, Vágner Adrienn, Tóth Imre (DE): **Benzil és hidroxietil oldalláncot tartalmazó AAZ3A ligandumok és Ga(III)-komplexeik egyensúlyi és kinetikai viselkedése**  
**E11**

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.23. szerda

**Elnök: Kripli Balázs (PE)**

9.00 – 9.20 Kovács Henrietta, Papp Gábor, Purgel Mihály, Kathó Ágnes, Joó Ferenc, Horváth  
**E12** Henrietta (DE): **Reverzibilis kémiai hidrogéntárolás irídium-komplexekkel**

9.20 – 9.40 Ölveti Gábor, Horváth Henrietta, Kathó Ágnes, Joó Ferenc, Papp Gábor (DE): **A**  
**E13** **cisz,mer-[IrH<sub>2</sub>Cl(mtpms)<sub>3</sub>] alkalmazása homogénkatalitikus CO<sub>2</sub> redukcióban**

9.40 – 10.00 Császár Zsófia, Svélecz Richárd, Bényei Attila, Lendvay György, Farkas Gergely,  
**E14** Bakos József (PE): **Királis P,N,N és P,N,O ligandumok koordinációs és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata**

10.00 – 10.20 Orosz Krisztina, Papp Gábor, Kathó Ágnes, Joó Ferenc, Horváth Henrietta (DE):  
**E15** **Ir(I)-NHC komplexek aktivitása hidrogénezési – dehidrogénezési reakciókban**

10.20 – 10.40 Bunda Szilvia, Voronova Krisztina, Udvardy Antal, Kovács Éva, Kathó Ágnes, Joó  
**E16** Ferenc (DE): **Átmenetifém komplexek előállítása és alkalmazása vizes közegű Suzuki kapcsolásban**

10.40 – 11.10 *Szünet*

05.23. szerda

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

11.10 – 11.30 Kállay Csilla, Csire Gizella, Kárpáti Eszter, Nagy Lajos (DE): **A réz(II)ion**  
**E17** **kölcsönhatása a prion protein kötőhelyeit modellező oligopeptiddel**

11.30 – 11.50 Csire Gizella, Bodnár Nikolett, Kállay Csilla, Nagy Lajos (DE): **Prion fehérje**  
**E18** **fragmense és mutánsai oxidációs körülményeinek optimalizálása egy nonapeptiden keresztül**

11.50 – 12.10 Fábián Zita, Heidi A. Ernst, Sine Larsen, Németh Eszter, Gyurcsik Béla (SzTE): **N-**  
**E19** **terminális NCoIE7 metallonukleáz mutánsok DNS komplexeinek szerkezete – röntgenkristallográfiai vizsgálatok**

12.10 – 12.30 Hermann Enikő, Czene Anikó, Wéber Edit, Hetényi Anasztázia, Martinek Tamás,  
**E20** Gyurcsik Béla (SzTE): **NCoIE7 és C127 fehérjék szerkezetének NMR spektroszkópiás vizsgálata**

12.30 – 14.00 *Szünet*

05.23. szerda

05.23. szerda

05.23. szerda

Elnök: Papp Gábor (DE)

- 14.00 – 14.20 Szűcs Rózsa, Pierre-Antoine Bouit, Muriel Hissler, Nyulászi László (BME): **Foszfor módosított PAH komplexek UV spektruma**  
**E21**
- 14.20 – 14.40 Kutus Bence, Dudás Csilla, Sipos Pál, Pálinkó István, Peintler Gábor (SzTE): **Magnézium(II)-glükonát komplexek semleges és lúgos vizes oldatokban**  
**E22**
- 14.40 – 15.00 Lihi Norbert, Pataki Balázs, Csire Gizella, Szakács Bence, Várnagy Katalin, Sóvágó Imre, Fábíán István (DE): **A NiSOD enzim fémkötő szakaszának vizsgálata**  
**E23**
- 15.00 – 15.20 Bashdar I. Meena, Balázs Kripli, Gábor Speier, József Kaizer (PE): **Kinetics and mechanism of epoxidation of olefins by chiral tetrapyrrolyl oxoiron(IV) complex**  
**E24**
- 15.20 – 15.40 Matyuska Ferenc, Tréfás Tamás, Nagy Nóra Veronika, Gajda Tamás (SzTE): **Egy antracén-tartalmú tripodális ligandum: oldategyensúly, fluoreszcencia, hidrolízis**  
**E25**

15.40 – 16.10 *Szünet*

**Koordinációs Kémiai Munkabizottság ülése. Elnök: Kaizer József (PE)**

- 16.10 – 16.25 Elnöki megnyitó
- 16.25 – 16.50 Kiss Tamás (SzTE): **Oldatkémiai kémiai kutatások régen és most Szegeden**  
**E26**
- 16.50 – 17.10 Buglyó Péter (DE): **Újabb eredmények és tervek a várhatóan hipoxia-aktivált kobalt(III) komplexek előállítására és vizsgálatára témakörben**  
**E27**
- 17.10 – 17.30 Várnagy Katalin, Dávid Ágnes (DE): **A patkány amilin peptid fragmenseinek átmenetifém komplexei**  
**E28**
- 17.30 – 17.50 Csapó Edit, Ungor Ditta, Juhász Ádám, Ahmed Mohsen Ismail (SzTE): **Nemesfém kolloidok: elektrokatalizátorok és optikai szenzorok fejlesztése**  
**E29**
- 17.50 – 18.10 Enyedy Éva A., Dömötör Orsolya, Jelena M. Poljarevic, Mészáros János P., May Nóra V., Gál Tamás G., Szatmári István, Fülöp Ferenc, Spengler Gabriella (SzTE): **8-Hidroxi-kinolin- és 2-pikolinsav-származékok fémorganikus félszendvics komplexeinek oldatkémiai vizsgálata**  
**E30**
- 18.10 – 18.20 Elnöki zárszó

05.23. szerda

05.23. szerda

05.23. szerda

05.23. szerda

05.23. szerda

05.23. szerda

05.23. szerda

**Elnök: Jakusch Tamás (SzTE)**

9.00 – 9.20 **E31** Botár Richárd, Kálmán Ferenc Krisztián, Tóth-Molnár Enikő, Tircsó Gyula (DE): **Egy új PC2A-származék, mint lehetséges „intelligens” MRI-kontrasztanyag: szintézis és jellemzés**

9.20 – 9.40 **E32** Nagy Imre, Nyujtó Nikolett, Ferenczik Gergő, Bényei Attila, Farkas Etelka, Buglyó Péter (DE): **Deferasirox-tartalmú komplexek szintézise és szerkezetvizsgálata**

9.40 – 10.00 **E33** Szorcsik Attila, Bezzeg Eszter, Hunyadi Attila, Nagy Nóra Veronika, Gajda Tamás (SzTE): **Flavonoid származékok kölcsönhatása réz(II)ionokkal**

10.00 – 10.20 **E34** Mesterházy Edit, Colette Lebrun, Jancsó Attila, Pascale Delangle (SzTE): **Cu(I)ionok hatékony megkötésére alkalmas  $\beta$ -turn motívumot és két ciszteint tartalmazó tetrapeptid**

10.20 – 10.40 **E35** Dudás Csilla, Kutus Bence, Böszörményi Éva, Peintler Gábor, Pálincó István, Sipos Pál (SzTE): **Hidrox- és oxokarbonsavak kalciumkompleképző sajátosságai semleges és lúgos oldatokban**

10.40 – 11.10 *Szünet*

**Elnök: Tircsó Gyula (DE)**

11.10 – 11.30 **E36** Mesterházy Edit, Colette Lebrun, Serge Crouzy, Jancsó Attila, Pascale Delangle (SzTE): **Metalloproteinek cisztein-gazdag Cu(I)- és Hg(II)-kötőhelyeit utánzó oligopeptidek**

11.30 – 11.50 **E37** Szorcsik Attila, Nagy Nóra Veronika, Matyuska Ferenc, Gajda Tamás (SzTE): **A  $\text{Cu}^{2+}$  és  $\text{Rh}(\text{Cp}^*)^{2+}$  ionok kölcsönhatása az  $\text{NH}_2\text{-HHH-NH}_2$  tripeptiddel**

11.50 – 12.10 **E38** Kripli Balázs, Kaizer József, Speier Gábor, Bashdar Ismael, Török Patrik (PE): **Funkcionális aldehid deformiláz modellek előállítása**

12.10 – 12.30 **E39** Ozsváth András, Diószegi Róbert, Farkas Etelka, Buglyó Péter (DE): **Pd(II)-ionok oldatbeli kölcsönhatásának vizsgálata peptidhidroxámsavakkal**

12.30 – 12.50 **E40** Kozsup Máté, Farkas Etelka, Bényei Attila, Buglyó Péter (DE): **Biológiailag aktív fluorokinolon származékok Co(III) komplexeinek előállítása és vizsgálata**



# **Előadás-összefoglalók**



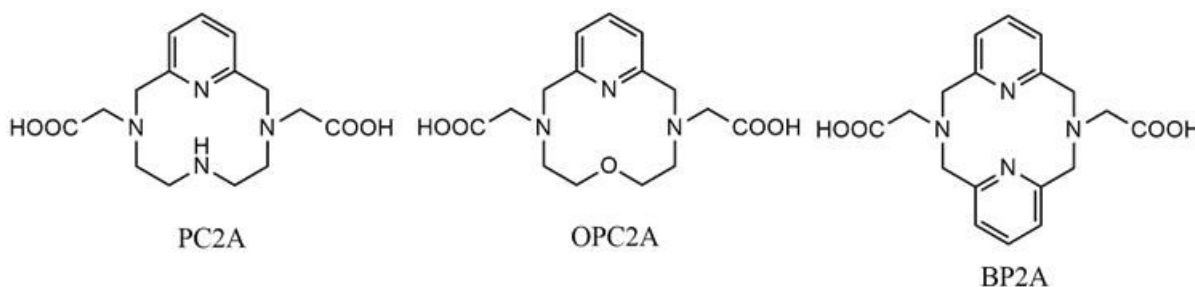
## Merevvázú makrociklusos ligandumok Gd(III)-komplexei: egyensúly, relaxometria és bomláskinetika

*Molnár Enikő, Tircsó Gyula*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: molnar.eniko@science.unideb.hu

A Mágneses Rezonanciás Képzőanyag (MRI) kontrasztanyagait a közelmúltban egy Nefrogén Szisztémás Fibrózis (NSF) néven ismertté vált súlyos vesebetegségeket érintő betegséggel hozták összefüggésbe. Újabb kutatások azonban rámutattak arra, hogy az egészséges vesefunkciójú páciensek esetében is történhet Gd-felhalmozódás (pl. az agyban és a csontokban) [1], ami élenkítőleg hat az eddigieknél inertebb Gd(III)-komplexe tervezésére. A ligandum „gerincének” merevítésével a képződő komplexek inertsége is nagymértékben növelhető, ezért célul tűztük ki piridincsoportot tartalmazó makrociklusos ligandumok, a PC2A, az OPC2A és a BP2A (1. ábra) Gd(III)-komplexeinek koordinációs kémiai vizsgálatát. Munkánk során meghatároztuk a képződő Gd(III)-komplexe stabilitási állandóit, relaxivitásukat, valamint vizsgáltuk a komplexek sav hatására történő disszociációjának sebességét. Az eredményeinket a szerkezetileg analóg ligandumok (DO3A, PCTA) komplexeire publikált adatokkal hasonlítjuk össze és értelmezzük az előadás során.



1. ábra. A PC2A, OPC2A és BP2A komplexképzők szerkezete.

[1] E. Kanal, M. F. Tweedle, *Radiology*, **2015**, 275, 630–634.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 sz. pályázata, a Magyar Tudományos Akadémia (Bolyai János Kutatói Ösztöndíj) és az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-17-3. kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programja támogatta.

### Gadolinium alapú MRI kontrasztanyagot tartalmazó humán vészérum vizsgálata induktív csatolású plazma optikai emissziós spektrometriával

*Tóth Csilla Noémi<sup>a</sup>, Baranyai Edina<sup>a</sup>, Harangi Sándor<sup>a</sup>, Baranyai Zsolt<sup>b</sup>, Fábíán István<sup>b</sup>*

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

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

e-mail: toth.csilla.noemi@science.unideb.hu

Korunk egyik leghatékonyabb orvosdiagnosztikai képalkotó eljárása a Mágneses Rezonanciás Képalkotás (MRI). Az MRI vizsgálatok során a kép élességének fokozása érdekében főként Gd<sup>III</sup>-komplexeket alkalmaznak, amelyek paramágneses sajátosságaik révén megnövelik oldószer protonok  $T_1$  relaxációs sebességét a képek világosodását eredményezve. A Gd<sup>III</sup> -komplexek *in vivo* viselkedésének ismerete a legutóbbi években különösen fontossá vált, mivel felismertek egy új betegséget (Nephrogenic Systemic Fibrosis - NSF), amelynek kialakulását a Gd<sup>III</sup>-komplexek *in vivo* disszociációjával és a felszabaduló Gd<sup>3+</sup>-ionok toxikus hatásával hozták összefüggésbe. Az NSF kialakulásának megértése érdekében elengedhetetlen a Gd<sup>III</sup>-komplexek és a vérplazma alkotói között kialakuló kölcsönhatások vizsgálata és a felszabaduló Gd<sup>III</sup>-ion *in vivo* speciációjának ismerete.

Vizsgálataink során Omniscan ([Gd(DTPA-BMA)]) kontrasztanyagot tartalmazó humán vészérum minták négy fontos fehérje frakcióját (Immunoglobulin G, transferrin, albumin és cöruoplazmin) választottuk el DEAE Trisacryl M anioncserélő gyantát alkalmazva UV spektrofotometriás követéssel. A kapott frakciók atmoszférikus roncsolását követően meghatároztuk az egyes minták Gd<sup>3+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup> és Ca<sup>2+</sup> koncentrációját ICP-OES (5100 Agilent Technologies) módszerrel.

Eredményeink alapján megállapítható, hogy a [Gd(DTPA-BMA)] komplex disszociációját követően felszabaduló Gd<sup>3+</sup> ionok főként az albuminhoz és cöruoplazminhoz koordinálódnak. A Gd<sup>3+</sup> és Ca<sup>2+</sup> ionok megoszlása a vizsgált négy fehérje esetében nagyon hasonló a két fémion hasonló kémiai sajátosságai miatt.

**Köszönetnyilvánítás:** Az elemanalitikai mérésekhez szükséges ICP-OES 5100 készüléket a Novo-Lab Kft. (Agilent Technologies) bocsátotta a rendelkezésünkre. A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

## Természetes eredetű (O,O) donoratomokat tartalmazó vegyületek félszendvics fémorganikus komplexeinek oldatkémiai vizsgálata

*Mészáros János P.<sup>a</sup>, Jelena M. Poljarević<sup>a</sup>, Heiko Geisler<sup>b</sup>, Veréb Fanni<sup>a</sup>, May Nóra V.<sup>c</sup>,  
Wolfgang Kandioller<sup>b</sup>, Bernhard K. Keppler<sup>b</sup>, Enyedy Éva A.<sup>a</sup>*

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

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

<sup>c</sup> MTA TTK, Műszercentrum, Kémiai Krisztallográfia Kutatólaboratórium

e-mail: meszaros.janos@chem.u-szeged.hu

Számos olyan természetes eredetű vegyület van, melyek rákellenes hatást mutatnak, emellett fémkomplexeikben (O,O)-donorként képesek viselkedni. A  $[\text{Rh}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\text{kurkumin})\text{Cl}]$  komplex esetén a komplexképződés pl. segíti a kurkumin sejtbe jutását, majd ott a fokozatos hatóanyag-leadást [1]. Több (O,O)-donoratomokat tartalmazó ligandum félszendvics Ru(II)- és Rh(III)- komplexét vizsgálták már korábban [2-4]. Jelen előadásban bemutatjuk három félszendvics kation, a  $[\text{Ru}(\eta^6\text{-}p\text{-cimol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ ,  $[\text{Ru}(\eta^6\text{-toluol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$  és  $[\text{Rh}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ , összehasonlító oldategyensúlyi vizsgálatát különböző természetes eredetű (lawsone, ftiokol, kurkumin) és egyéb egyszerű (O,O) donor ligandummal (maltol, allomaltol, deferipron, acetyl-aceton). Az vizsgálatokhoz pH-potenciometria, <sup>1</sup>H NMR spektroszkópia és UV-látható spektrofotometria módszereket használtunk. A kapott stabilitási állandók által mutatott trend minden esetben:  $\text{Ru}(\eta^6\text{-}p\text{-cimol}) > \text{Ru}(\eta^6\text{-toluol}) > \text{Rh}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)$ .

- [1] J. Markham, J. Liang, A. Levina, R. Mak, B. Johannessen, P. Kappen, C.J. Glover, B. Lai, S. Vogt, P.A. Lay, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2017**, 1812.
- [2] L. Bíró, E. Farkas, P. Buglyó, *Dalton Trans.*, **2010**, 39, 10272.
- [3] O. Dömötör, S. Aicher, M. Schmidlehner, M.S. Novak, A. Roller, M.A. Jakupec, W. Kandioller, C.G. Hartinger, B.K. Keppler, É.A. Enyedy, *J. Inorg. Biochem.*, **2014**, 134, 57.
- [4] É.A. Enyedy, O. Dömötör, C.M. Hackl, A. Roller, M.S. Novak, M.A. Jakupec, B.K. Keppler, W. Kandioller, *J. Coord. Chem.*, **2015**, 68, 1583.

**Köszönetnyilvánítás:** az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-17-3 (M.J.P.) és UNKP-17-4 (E.É.A.) kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával, illetve az NKFIÁ FK 124240 és GINOP-2.3.2-15-2016-00038 projekt támogatásával készült.

### [Co<sup>III</sup>(NN)(NN)(OO)]<sup>2+</sup> összetételű komplexek előállítása és analitikai jellemzése

*Nagy Sándor<sup>a</sup>, Farkas Etelka<sup>a</sup>, Bényei Attila Csaba<sup>b</sup>, Buglyó Péter<sup>a</sup>*

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

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

e-mail: nagy.sandor@science.unideb.hu

A gyógyászatban alkalmazott daganatellenes szerek szelektivitásának hiányával kapcsolatban felmerülő problémák leküzdéséhez, az inert kobalt(III) komplexek jó alapul szolgálhatnak, amelyek szelektíven redukálódhatnak hipoxiás környezetben. A kevésbé stabil és labilis Co(II) komplexből felszabaduló gyógyszer-molekulák így szelektíven kifejthetik hatásukat [1].

Korábbi eredmények azt mutatták, hogy a 4N+2O donoratombok biológiai szempontból releváns redukciós potenciált biztosítanak az oktaéderez Co(III) komplexeknek. Ezen a vonalon viszonylag nagy számú, 4N donorként tripodális tetramint és (bio)molekulát tartalmazó komplexet állítottak elő és vizsgáltak az elmúlt időszakban [2-4]. Nemrégiben azt is kimutatták, hogy az O,O donor funkcionálizálása, a 4N donor jellege (alifás vagy aromás) illetve a kialakuló kelát mérete lehetővé teszi a vegyes ligandumú Co(III) komplexek redoxi sajátságainak finomhangolását [5].

További szerkezeti változás érhető el a 4N donor kelátképző két (NN) donorúra való cserélésével, amely lehetővé teszi a termodinamikai stabilitás változtatását és megváltoztathatja a hordozómolekula redoxi tulajdonságait. Ennek a területnek a megismeréséhez (NN)(NN)(OO) típusú Co(III) komplexeket terveztünk, állítottunk elő és vizsgáltunk. Olyan, egyszerű (OO) donorú ligandumokat alkalmaztunk, amelyek funkcionálizálása a későbbiekben lehetővé teszi egy várhatóan rákellenes hatású újabb fémion megkötését is. Az előadás keretében ezeket az eredményeket tervezzük bemutatni.

[1] M. D. Hall, T. W. Failes, N. Yamamoto, T. W. Hambley, *Dalton Trans.*, **2007**, 3983-3990.

[2] T.W. Failes, T.W. Hambley et al., *Chem. Eur. J.*, **2007**, 13, 2974-2982.

[3] T.W. Failes, T.W. Hambley, *Dalton Trans.*, **2006**, 1895-1901.

[4] P.D. Bonnitche, T.W. Hambley et al., *Dalton Trans.*, **2012**, 41, 11293-11304.

[5] P. Buglyó, et al., *Inorg. Chim. Acta*, **2018**, 472, 234-242.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA (K112317) anyagi támogatása mellett a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valamint az OTKA támogatásával (K112317) valósult meg.

## Szenzorként alkalmazható ferrocén tartalmú karbamidszármazékok vizsgálata

*Keszei Soma<sup>a</sup>, Balogh Szabolcs<sup>b</sup>, Nagy Lívia<sup>c</sup>, Skodáné Földes Rita<sup>a</sup>, Lendvay György<sup>d</sup>*

<sup>a</sup> Szerves Kémiai Intézeti Tanszék, Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Wartha Vince u. 1, N épület, 3. emelet

<sup>b</sup> NMR Laboratórium, Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

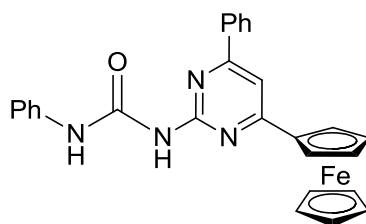
<sup>c</sup> Általános és Fizikai-Kémia Tanszék, Pécsi Tudományegyetem, Pécs Ifjúság u.6.

<sup>d</sup> MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2. Magyarország

e-mail: keszei.soma@mk.uni-pannon.hu

Az utóbbi években a különböző molekulák vagy ionok érzékelésére fejlesztett szenzorok száma egyre növekszik, jelezve ezzel a terület nyújtotta új lehetőségeket. A kialakított szenzor-vegyületek nagy része különböző jelölő elemekkel ellátott karbamid-származék [1].

A legtöbb erős savak érzékelésére vonatkozó módszer a protonálódás okozta színváltozáson alapszik, azonban nem adnak az adott sav anionjáról kvalitatív információt. Munkám célja, hogy egy erős savak anionjait érzékelni képes szenzor-molekulát állítsak elő, mely ötvözi a karbamid funkciós csoport kedvező komplexképző tulajdonságait és a ferrocén elektrokémiai követhetőségét. Emellett a molekulába épített kromofór csoportok további lehetőséget nyújtanak az érzékelésre.



1. ábra Szenzorként alkalmazott ferrocén-származék

Az előállított vegyület viselkedését  $\text{CF}_3\text{COOH}$  és  $\text{CF}_3\text{SO}_3\text{H}$  jelenlétében elektrokémiai és spektroszkópiai módszerekkel, valamint kvantumkémiai számításokkal vizsgáltam.

[1] V. B. Bregovič; N. Basarič; K. Mlinarič -Majerski, *Coord. Chem. Rev.* **2015**, 295, 80-124

## Nyíltláncú ligandumokkal képzett $Mn^{2+}$ -komplexek előállítása és koordinációs kémiai jellemzése

*Csupász Tibor<sup>a</sup>, Váradi Balázs<sup>a</sup>, Garda Zoltán<sup>a</sup>, Baranyai Zsolt<sup>b</sup>, Ghiani Simona<sup>b</sup>,  
Maiocchi Alessandro<sup>b</sup>, Tóth Imre<sup>a</sup>, Tirscó Gyula<sup>a</sup>*

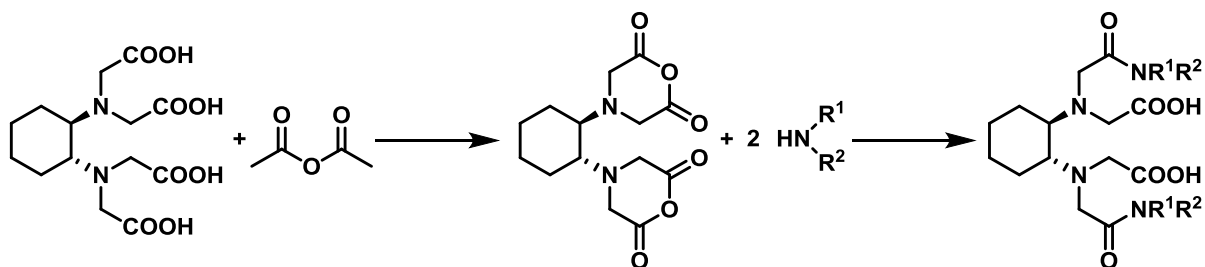
<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Bracco Imaging SpA, Via Ribes 5, 10010 Colleterto Giacosa, Italy

e-mail: csupasz.tibor@science.unideb.hu

Az orvosi diagnosztika fontos eljárása a Mágneses Rezonanciás Képpalkotás (MRI). A felvételek kontrasztosságának növelésére kereskedelmi forgalomban kapható, Gd(III)-iont tartalmazó kontrasztanyagokat (KA) használnak. Az utóbbi években azonban megingott az ilyen készítményekbe vetett bizalom. Azoknál a csökkent vesefunkciójú, vagy májátültetésen átesett betegeknél, akiknél többször gadolínium-kontrasztanyag MRI-vizsgálatot végeztek, a felszabaduló fémion komoly betegséget okozott (Nefrogén Szisztémás Fibrozis). Így a kutatások új irányvonala az emberi szervezet által jobban tolerálható, esszenciális fémionokat tartalmazó KA-ok tervezése lett, amely biztonságosabb megoldást hozhat az MRI-ben.

A kutatócsoportunk a Bracco Imaging SpA céggel karöltve olyan új nyíltláncú ligandumok  $Mn^{2+}$ -komplexeit állította elő és végezte el kémiai jellemzésüket, melyek potenciálisan új típusú kontrasztanyagok lehetnek. Az előállított 10 nyíltláncú ligandumra alapozó  $Mn^{2+}$ -komplexek stabilitása ( $\log K_{ML}=12,66-13,33$ ) megközelíti az általában jobb paraméterekkel bíró makrociklusos komplexekét. Emellett ezek a vegyületek megfelelően inertek is ( $t_{1/2}=157-1269$  h), így alkalmas KA-ok lehetnek humán alkalmazásra is.



A ligandumok előállításának általános sémája

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A vizsgálatunkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 sz. pályázata, és a Magyar Tudományos Akadémia (Bolyai János Kutatói Ösztöndíj) is támogatta.



## Ciklén-származékok Mn(II)-komplexeinek fizikai-kémiai tulajdonságai: egyensúly, relaxivitás és bomláskinetika

*Garda Zoltán<sup>a</sup>, Molnár Enikő<sup>a</sup>, Botár Richárd<sup>a</sup>, Nagy Viktória<sup>a</sup>, Baranyai Zsolt<sup>b</sup>, Kovács Zoltán<sup>c</sup>, Brücher Ernő<sup>a</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>a</sup>, Tóth Imre<sup>a</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>*

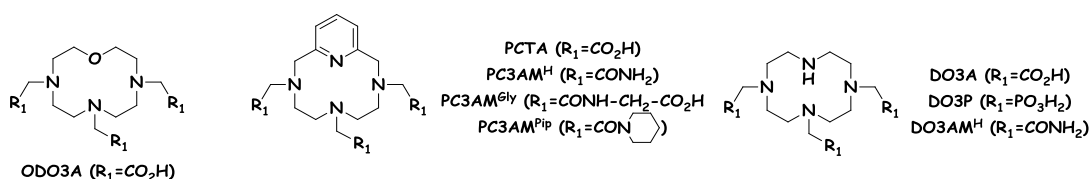
<sup>a</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>b</sup> Bracco Imaging spa, Bracco Research Centre

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

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

Az elmúlt években kiemelt érdeklődés övezte a Mn(II)-ion nyíltláncú és makrociklusos ligandumokkal képzett komplexeit, mivel alternatívái lehetnek a forgalomban lévő Gd(III)-alapú Mágneses Rezonanciás Képkalkotás (MRI) kontrasztanyagainak. Jelen munka célja a ligandumok szerkezete és a képződő Mn(II)-komplekek fizikokémiai (stabilitás ( $\log K_{MnL}$  vagy  $pMn$ ), inertség (savkatalizált disszociációra jellemző sebességi állandó,  $k_1$ , vagy a disszociációra jellemző felezési idő  $t_{1/2}$ ), relaxivitás ( $r_{1p}$ ), stb.) paramétereit közötti összefüggések feltérképezése volt nagyszámú háromszorosan helyettesített 12-tagú makrociklusos ligandum bevonásával. A ligandumokat úgy választottuk ki, hogy a vizsgálat információt szolgáltatson arra vonatkozóan, hogy a kelátor merevítése, a makrociklusban lévő donortatomok minősége (piridin N, amin és éteres oxigén atom) és az oldalláncok természete (karboxilátcsoportok foszfonát-, ill. amidcsoporra történő cseréje) milyen hatással van a képződő Mn(II)-komplekek fizikokémiai paramétereire. Tapasztalataink alapján a DOTA ligandum ( $pMn=9,02$ ,  $k_1=0,04 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ ) egyik karboxilátcsoportjának eltávolítása (DO3A,  $pMn=8,66$ ,  $k_1=0,45 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ ) a stabilitás és az inertség jelentős csökkenését eredményezi. Ez a csökkenés azonban ellensúlyozható, ha a ligandum gerincét merevebbé tesszük, pl. az egyik nitrogénatom piridin gyűrűbe történő „kényszerítésével” (PCTA,  $pMn=9,74$ ,  $k_1=0,082 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$ ). Hasonló pozitív tapasztalatunk volt az acetátcsoportok amidcsoportokra történő cseréjével is. Emellett az amidcsoportok természete is jelentősen befolyásolja a Mn(II)-kelátok termodinamikai és kinetikai paramétereit, míg a realxációs hatásukat kevésbé érinti.



A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. Köszönet illeti a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalt az anyagi támogatásért (NKFIH-120224 sz. pályázat).

### 1,4,7-triazaciknononán és piklén-alapú bifunkciós ligandumok előállítása és komplexképző sajátságai vizsgálata

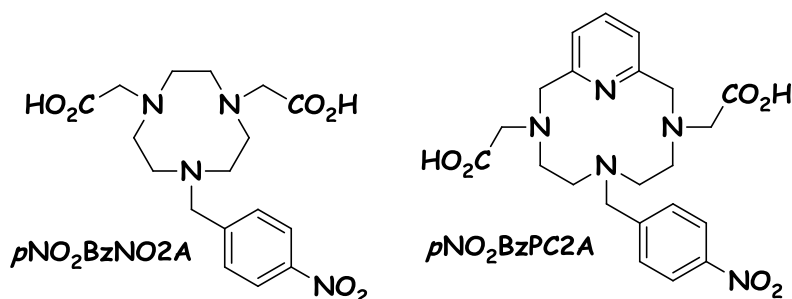
Váradi Balázs<sup>a</sup>, Gogolak Réka Anna<sup>a</sup>, Gáll Kitti<sup>a</sup>, Bényei Attila Csaba<sup>b</sup>, Tóth Imre<sup>a</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>

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

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

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

A célzott diagnosztikai/terápiás eljárások gyakran alapoznak kombinát/kapcsolt technikákra (pl. PET-MRI), amelyek egyesítik a két „szülő” vizsgálómódszer előnyeit (jelen esetben a PET kiemelkedő érzékenységeivel az MRI képalkotás nagy felbontóképessége társul). A diagnosztikai jelért (ill. a terápiás hatásért) felelős izotópok komplexeit bifunkciós ligandumok (BFL) segítségével kapcsolják a vektorhoz, a „taximolekulához”.  $Mn^{2+}$ -komplexekre is alapozható ilyen eljárás, mivel ugyanazon ligandummal képződő különböző izotópok komplexeinek a megfelelő keveréke az MRI ( $^{55}Mn$ ), ill. a PET ( $^{52g}Mn$ ) technikákban szimultán hasznosulhat. A  $Mn^{2+}$ -ion megkötésére ez idáig a kevésbé inert komplexet képző nyíltláncú ligandumokat javasolták az irodalomban. Munkánk során előállítottuk a  $pNO_2BzNO_2A$  és a  $pNO_2BzPC_2A$  makrociklusos ligandumokat (1. ábra). Meghatároztuk a komplexképzők protonálódási állandóit, ill. a legfontosabb kétvegyértékű fémionokkal ( $Mg^{2+}$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Mn^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$  és  $Zn^{2+}$ ) képződő komplexeik stabilitását. Tanulmányoztuk a  $Mn^{2+}$ -komplexek bomláskinetikáját és meghatároztuk a kelátok relaxivitását. Az eredményeinket a szerkezetileg hasonló ligandumok komplexeire publikált adatokkal hasonlítjuk össze és értelmezzük az előadás során.



1. ábra. A  $pNO_2BzNO_2A$  és a  $pNO_2BzPC_2A$  komplexképzők szerkezete.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 sz. pályázata, és a Magyar Tudományos Akadémia (Bolyai János Kutatói Ösztöndíj) is támogatta.

## Királis N-donor ligandumokat tartalmazó vas-, és mangántartalmú komplexek vizsgálata vizes rendszerekben

Sólyom Bernadett, Kripli Balázs, Kaizer József, Speier Gábor

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék, H-8200 Veszprém

e-mail: balazskripli@gmail.com

A katalázok enzimek az egyik legfontosabb védelmi funkciót ellátó enzimek szervezetünkben. A különböző biológiai folyamatokban keletkező hidrogén-peroxidot dioxigénné és vízzé alakítják át, méghozzá a katalizátorfehérjék közül a legnagyobb hatásfokkal. Ezek a vegyületek a vas-, és mangántartalmú metalloenzimek csoportjába sorolhatók [1,2].

Kutatócsoportunkban korábban prekursor Mn(II)-, és Fe(II)-komplexeket állítottak elő, amelyekhez a királis, ötfogú, N-donor ligandumokat, nevezetesen az asN4Py (N4Py = *N,N*-bisz(2-piridilmetil)-1,2-di(2-piridil)-etil-amin) és az asN2Py2QUIN (N2Py2QUIN = *N,N*-bisz(2-kinolinil-metil)-1,2-di(2-piridil)-etil-amint) használták fel.

A jelenlegi munka során ezekből a prekursor vegyületekből képződő vas(IV)-oxo és Mn(IV)-oxo intermedierek stabilitását vizsgáltuk MeCN-vizes pH 7 és 11 közötti pufferoldatokban, továbbá reaktivitásukat hidrogén-peroxiddal, mint szubsztráttal szemben. A katalitikus reakciókat a fenti körülményekhez hasonlóan gázvolumetrikus módszer segítségével követtük. A sztöchiometrikus és katalitikus rendszereken végzett potenciometriás és reakciókinetikai mérések alapján javaslatot tettünk a vizsgált reakciók mechanizmusára.

[1] Braymer J.J., O'Neill K.P., Rohde J.U., Lim Mi.H.: *Angew.Chem. Int. Ed.*, **2012**, 51, 5376-5380.

[2] Sastri C.V., Seo M.S., Park M.J., Kim K.M., Nam W.: *Chem. Commun.*, **2005**, 1405-1407.

**Köszönetnyilvánítás:** Az OTKA K108489 kutatási pályázat által nyújtott támogatásért.

### Kismolekulák és fehérjék kölcsönhatása DNS-sel fémionok jelenlétében

*Hajdu Bálint<sup>a</sup>, Kiricsi M.<sup>b</sup>, Moncol J.<sup>c</sup>, Gyurcsik B.<sup>a\*</sup>*

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

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Biokémiai és Molekuláris Biológiai Tanszék

<sup>c</sup> Slovak University of Technology in Bratislava Department of Inorganic Chemistry, Slovakia  
e-mail: balinth11@gmail.com

Kutatásaink alapvető célja újfajta potenciális terápiás vegyületek előállítása, hatásuk optimalizálása. A cinkujj fehérjék moduláris felépítésű specifikus DNS-kötő fehérjék, és oly módon tervezhetők, hogy szinte bármilyen kiválasztott DNS szakaszt felismerjenek. Ezáltal specifikus DNS módosító eszközökké is átalakíthatók, mint a cinkujj-nukleázok, melyek genetikai eredetű betegségek gyógyítására lehetnek alkalmasak a DNS-javító mechanizmusok indukálásán keresztül [1]. Ezzel párhuzamosan fluorozott vegyületek átmenetifémionokkal alkotott komplexeinek oldatkémiai, *in vitro* és *ex vivo* viselkedését is vizsgáljuk, mivel számos kutatás azt igazolta, hogy egy fluoratom bevitele egy egyébként is aktív biológiai hatással rendelkező vegyületbe jelentősen növelheti a hatáserősséget [2].

Kísérleteink központjában elsősorban a DNS állt, ugyanis a fent említett fémtartalmú molekulák kölcsönhatásba léphetnek vele. Ebből kifolyólag alaposabban megvizsgáltuk a lehetséges folyamatokat. Tanulmányoztuk fluoroszalicilsav:2,6-piridindimetanol:Zn(II) és Ni(II) 2:2:1 vegyesligandumú komplexek reakcióját DNS-sel. Vizsgáltuk az alkalmazott puffer szerepét és az aszkorbinsav vagy hidrogén-peroxid hatását is. Tapasztalataink alapján sikerült meghatározni az optimális körülményeket a fehérje DNS-kísérletek kivitelezéséhez. Elvégeztük a cinkujj fehérjék DNS-felismerésének, illetve specifitásának finomhangolását az ionerősség segítségével. Több esetben, megfigyeltük, hogy a DNS molekula megvédte a cinkujj fehérjét szerkezetének összeomlásától. Egy általunk kialakított potenciális cinkujj nukleáz segítségével pedig igazoltuk, hogy a körülmények változtatásával lehetséges ugyanazon molekulával védeni a DNS-t a nem kívánt hasításoktól vagy elhasítani azt specifikusan.

[1] Y.G. Kim, J. Cha, S. Chandrasegaran, *Proc. Natl Acad. Sci.*, **1996**, 93, 1156–1160

[2] T.-Sz. Plánka, J. Moncol, E. Tóth, B. Gyurcsik, N.-V. Nagy, Z. Vasková, A. Rockenbauer, D. Valigura, *Polyhedron* **2011**, 30 2421-2429.



AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA UNKP-17-2 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT”

## Benzil és hidroxi-etil oldalláncot tartalmazó AAZ3A ligandumok és Ga(III)-komplexeik egyensúlyi és kinetikai viselkedése

*Horváth Dávid<sup>a</sup>, Baranyai Zsolt<sup>b</sup>, Babinszkiné Farkas Edit<sup>a</sup>, Vágner Adrienn<sup>a,c</sup>, Tóth Imre<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen Egyetem tér 1.

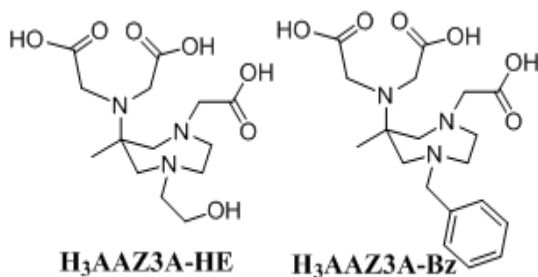
<sup>b</sup> Bracco Imaging S.p.A., Colleretto, Italy

<sup>c</sup> Scanomed Kft., 4032 Debrecen Nagyerdei Krt. 98.

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

Napjainkban intenzív kutatás folyik olyan <sup>68</sup>Ga alapú radiofarmakonok előállítására, amelyek a nukleáris medicinában Pozitron Emissziós Tomográfias vizsgálatok során alkalmazhatóak. Korábbi kutatások alapján a makrociklusos poliamino-polikarboxilát ligandumok (NOTA és DOTA) alkalmasak a Ga<sup>3+</sup>-ion komplexálására, de a jelzési folyamat lassú. [1-2]

A 7 donor atomot tartalmazó AAZTA ligandum gyors reakcióban szokatlanul stabil és kinetikailag inert [Ga(AAZTA)OH]<sup>2-</sup> összetételű komplexet képez Ga<sup>3+</sup> ionnal. [3] Ezért vizsgáltuk az AAZ3A-HE és AAZ3A-Bz analóg származékok komplexeit. <sup>1</sup>H és <sup>67</sup>Ga NMR, UV-spektrofotometria és pH-potencimetria segítségével meghatároztuk a ligandumok és



néhány fémionnal kialakuló komplex protonálódási és stabilitási állandóit. Fiziológias pH-n a [GaL(OH)]<sup>-</sup> komplex a domináns, és a gyűrű acetát csoportjának cseréje csökkenti a Zn<sup>II</sup>, Cu<sup>II</sup> és Ga<sup>III</sup>-ionokkal kialakuló komplexek stabilitását. Az előadásban értelmezzük a származékok előnyös és hátrányos tulajdonságait.

**1. ábra A H<sub>3</sub>AAZ3A-HE és H<sub>3</sub>AAZ3A-Bz ligandumok szerkezete**

- [1] J. Notni, P. Hermann, J. Havlickova, J. Kotek, V. Kubicek, J. Plutnar, N. Loktinova, P. J. Riss, F. Rösch, I. Lukes, *Chem. Eur. J.*, **2010**, 16, 7174-7185; [2] V. Kubicek, J. Havlickova, J. Kotek, Gy. Tirso, P. Hermann, É. Tóth, I. Lukes, *Inorg. Chem.*, **2010**, 49, 10960-10969; [3] Zs. Baranyai, F. Uggeri, A. Maiocchi, G. B. Giovenzana, C. Cavallotti, A. Takács, I. Tóth, I. Bányai, A. Bényei, E. Brücher, S. Aim, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2013, 147–162.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

### Reverzibilis kémiai hidrogéntárolás irídium-komplexekkel

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

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

<sup>b</sup> MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen  
e-mail : kovacsHenrietta@science.unideb.hu

Az újrafelhasználható energiaforrásokból való folyamatos energiakinyeréshez fontos szempont a biztonságos hidrogénfejlesztés és hidrogéntárolás kérdése. Korábbi munkánk során számos új, vízdoldható irídium(I)-NHC-foszfin komplexet tanulmányoztunk a formiát bontás, illetve hidrogénkarbonát hidrogénezési reakciójában. Az újszerű, irídium(I)-alapú, vízdoldható foszfin-NHC (N-heterociklusos karbén) komplexek; a  $\text{Na}_2[\text{Ir}(\text{emim})(\text{cod})(\text{mtppts})]$  és az  $[\text{Ir}(\text{cod})(\text{emim})(\text{mtpms})]$  nagyon hatékony katalizátornak bizonyultak a reverzibilis, formiát-hidrogénkarbonát alapú hidrogéntárolásban<sup>[1],[2]</sup>. Sikeresen katalizálják a katalitikus ciklus mindkét oldalát. A formiát bontás közben keletkező hidrogéngáz számos célra alkalmazható, többek között PEM hidrogén üzemanyagcellában történő elégetésével elektromos áram nyerhető.

A formiát-hidrogénkarbonát katalitikus ciklust tanulmányoztuk folyamatos áramlású mikrofluid reaktorban (H-Cube<sup>®</sup>, ThalesNano Nanotechnology Inc.), homogén, illetve heterogén fázisban is. Homogén fázisban az  $[\text{Ir}(\text{cod})(\text{emim})(\text{mtpms})]$  komplex mutatott kiemelkedő aktivitást, míg a  $\text{Na}_2[\text{Ir}(\text{emim})(\text{cod})(\text{mtppts})]$  komplex rögzítése anioncserélő gyantákon katalitikusan igen aktív és stabilis heterogenizált katalizátorokat eredményezett.

Vizsgáltam a biológiai rendszerekben is biztonságosan alkalmazható, 'cod' ligandum mentes irídium(I)-hidrid-foszfin-NHC komplexek előállításának a lehetőségét.

[1] Horváth, H., Papp, G., Kathó, Á., Joó, F.: *Hung. Pat. Appl.* **2013**, P1300539; **WO 2015/040440 A2**.

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

A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-1 PD115535) is.

## A *cisz,mer*-[IrH<sub>2</sub>Cl(*mtppps*)<sub>3</sub>] alkalmazása homogénkatalitikus CO<sub>2</sub> redukcióban

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

*Joó Ferenc*<sup>a</sup>, *Papp Gábor*<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Debreceni Egyetem – Fizikai Kémiai tanszék; H-4002 Debrecen, Egyetem tér 1. pf. 400

<sup>b</sup> MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport; H-4002 Debrecen, Egyetem tér 1. pf. 400

e-mail: olvetigabor@gmail.com

A megújuló energiaforrások által termelt energia biztonságos és reverzibilis tárolása mind az alap mind pedig az alkalmazott kutatások középpontjában álló kérdés. Ennek egyik megvalósulási módja lehet a hidrogénben való energiátárolás, mivel a hidrogénben tárolt energia felszabadítása viszonylag egyszerűen megvalósítható. A molekuláris hidrogén biztonságos és reverzibilis kémiai tárolására sokféle javaslat, elképzelés létezik, de a minden területen alkalmazható, univerzális megoldás még nem megoldott.

A HCOOH egyike a lehetséges és alkalmazható munkaanyagoknak a hidrogén tárolásban. A hangyasav 4,4 tömeg % (54g/l) hidrogént tartalmaz normál körülmények között. Léteznek igen aktív homogén és heterogén katalizátorok, melyek alkalmasak a CO<sub>2</sub> redukciójára és az így előállított HCOOH/formiát bontására. Azonban számos esetben valamilyen adalékanyag (pl. bázis, aminok, stb.) szükséges ezekhez a katalitikus folyamatokhoz.

A Debreceni Egyetemen működő MTA kutatócsoport is intenzív kutatásokat folytat a vizes közegű hidrogén tárolás témakörében.[1-3] A kutatócsoportban előállított *cisz, mer*-[IrH<sub>2</sub>Cl(*mtppps*)<sub>3</sub>] (amely nagy aktivitással vesz részt a hangyasav homogénkatalitikus dehidrogénezésében) katalizátor alkalmazható a CO<sub>2</sub> redukciója során is – ami a bontás visszairányú folyamatának felel meg. Vizsgálati eredményeinknek köszönhetően a körfolyamat mindkét oldala egzakt módon megvalósításra kerül vizes közegben.

[1] G. Papp, J. Csorba, G. Laurenczy, F. Joó, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2011**, 50, 10433

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

[3] G. Papp, G. Ölveti, H. Horváth, Á. Kathó, F. Joó, *Dalton Trans.*, **2016**, 45, 14519

**Köszönetnyilvánítás:** A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-1 PD115535). A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. Az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-17-2. kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

### Királis P,N,N és P,N,O ligandumok koordinációs és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata

*Császár Zsófia<sup>a</sup>, Svélecz Richárd<sup>a</sup>, Bényei Attila<sup>b</sup>, Lendvay György<sup>c</sup>, Farkas Gergely<sup>a</sup>,  
Bakos József<sup>a</sup>*

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

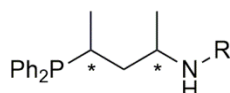
<sup>b</sup> Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

<sup>c</sup> MTA TTK, Anyag- és Környezatkémiai Intézet

e-mail: csaszofi@gmail.com

A királis, kétfogú ligandumok szerkezeti finomhangolásával kiváló katalitikus rendszerek állíthatók elő. E vegyületek között kiemelkedőek a foszfor és nitrogén donoratomokat tartalmazó ligandumok, melyek egyedülálló sztereo-elektronikus tulajdonságokkal rendelkeznek. A foszfin-amin ligandumok hatékonysága növelhető egy harmadik, további koordinációra képes heteroatomot tartalmazó oldallánc kialakításával. Az új donoratom koordinációs képessége jelentősen befolyásolhatja a vegyület katalitikus tulajdonságait [1].

Munkánk során potenciálisan háromfogú, királis P,N,N és P,N,O ligandumokat állítottunk elő. Az új vegyületek koordinációs tulajdonságait kvantumkémiai, spektroszkópiai és röntgendiffrakciós módszerek segítségével jellemeztük.



- 1 (S,S): R = (CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>
- 2 (S,S): R = (CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>
- 3 (S,S): R = 2-pikolil
- 4 (S,S): R = (CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OH
- 5 (S,S): R = (CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OCH<sub>3</sub>
- 6 (S,S): R = (S)-CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH
- 7 (R,R): R = (S)-CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>OH

Az előállított ligandumok katalitikus jellemzőit aszimmetrikus hidrogénezési és allil-helyzetű szubsztitúciós reakciókban vizsgáltuk. Az új ligandumok segítségével kiváló aktivitást és enantioszelektivitást (96%) értünk el.

[1] Xie, J-H.; Liu, X-Y.; Xie, J-B.; Wang, L-X.; Zhou, Q-L. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2011**, *50*, 7329.

#### Köszönetnyilvánítás:



A kutatás az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-17-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának és az NKFIH K 115539, VEKOP-2.3.2-16-2017-00013, GINOP-

2.3.2-15-2016-00008 és GINOP-2.3.3-15-2016-00004 projektek támogatásával készült.



## Ir(I)-NHC komplexek aktivitása hidrogénezési – dehidrogénezési reakciókban

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

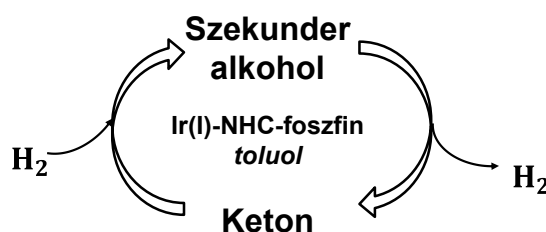
<sup>a</sup> Debreceni Egyetem – Fizikai Kémiai tanszék; H-4002 Debrecen, Egyetem tér 1. pf. 400

<sup>b</sup> MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport; H-4002 Debrecen, Egyetem tér 1. pf. 400

e-mail: krisztina.orosz22@gmail.com

Az ipari folyamatok és antropogén hatások környezeti következményei miatt napjainkban egyre nagyobb figyelmet fordítanak a kémiai folyamatok zöldebbé tételére, másrésről a növekvő energiaigény kielégítése miatt alternatív energiaforrások keresésére. A ketonok katalitikus hidrogénezése, legegyszerűbb és leghatékonyabb módja az alkoholok előállításának. Másrésről a transzfer hidrogénezés vonzó alternatívát jelent a hidrogénezésre, mivel bázisra és hidrogén donorra van csak szükség. A karbonil vegyületek reverzibilis hidrogénezése és az alkoholok adalékmentes dehidrogénezése ígéretes alternatív megoldást kínál a hidrogén előállítására és tárolására.<sup>[2][3]</sup>

Munkánk során sikerrel alkalmaztuk a különböző Ir(I)-kARBÉN illetve Ir(I)-kARBÉN-foszfin<sup>[1]</sup> komplexeket ketonok hidrogénezésében, transzfer hidrogénezésében és a ketonok hidrogénezésekor nyert megfelelő alkoholok adalékmentes dehidrogénezésében.



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

[2] Orosz Krisztina, *Diplomamunka*, **2017**.

[3] Orosz Krisztina, *OTDK dolgozat*, **2018**.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz (NKFI-1 PD115535) is.

## Átmenetifém komplexek előállítása és alkalmazása vizes közegű Suzuki kapcsolásban

*Bunda Szilvia<sup>a</sup>, Voronova Krisztina<sup>b</sup>, Udvardy Antal<sup>a</sup>, Kováts Éva<sup>c</sup>, Kathó Ágnes<sup>a</sup>,  
Joó Ferenc<sup>a</sup>*

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

<sup>b</sup> University of the Pacific, Department of Chemistry, Stockton, CA, USA

<sup>c</sup> MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

e-mail: bunda.szilvia@science.unideb.hu

A klasszikus szén-szén kötést kialakító módszerek mellett az átmenetifémek által katalizált keresztkapcsolási reakciók jelentősen kibővítették a szintetikus szerves kémia lehetőségeit. Napjainkban ezek a reakciók kiemelkedő szerepet játszanak, mivel alkalmazásukkal olyan bonyolult szerkezetű molekulák állíthatók elő viszonylag egyszerűen, melyeket korábban csak körülményesen, vagy egyáltalán nem tudtak szintetizálni.

A Suzuki-Miyaura kapcsolat is ezen átalakítások közé tartozik. A szén-szén kapcsolások egyik legsokoldalúbb fajtája, amivel biaril származékokat állíthatunk elő bórorganikus vegyületek alkalmazásával. Ezen szubsztrátumok nagy előnye, hogy csekély toxicitással bírnak és stabilisak vizes közegben, aerob körülmények között is. A környezetbarát szintézistechnikák kifejlesztésével a vizes közeg alkalmazása is egyre elterjedtebbé válik, ugyanis nemcsak biztonságosabb és olcsóbb a reakciók kivitelezése, de a termékek is egyszerűen izolálhatóak a reakcióelegyből, míg a vízdoldható katalizátort tartalmazó vizes fázis további reakciókban is felhasználható [1; 2].

Munkánk során ezért célunk volt, olyan átmenetifém (elsősorban Pd(II), Ni(II), Cu(II) esetekre) komplexek előállítása, melyek aktívak lehetnek vizes közegű Suzuki kapcsolásban. Továbbá, hogy a biaril származékok előállítását, szerves oldószer alkalmazása nélkül végezhessük el. Ezen termékek közül néhányat meghatároztuk a molekulászerkezetét is.

[1] K. Voronova, H. Levente, A. Udvardy, A. C. Bényei, F. Joó: *ChemSusChem*, **2014**, 7, 2230–2239.

[2] K. Voronova, M. Purgel, A. Udvardy, A. C. Bényei, Á. Kathó, F. Joó: *Organometallics*, **2013**, 32, 4391–4401.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

## A réz(II)ion kölcsönhatása a prion protein kötőhelyeit modellező oligopeptiddel

*Kállay Csilla<sup>a</sup>, Csire Gizella<sup>b</sup>, Kárpáti Eszter<sup>b</sup>, Nagy Lajos<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

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

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

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

Jól ismert, hogy egyes fémionok fontos szerepet játszanak a neurodegeneratív elváltozások kifejlődésében és ezen betegségek lefolyásában is. Ezek a folyamatok a fehérjemolekulák konformációváltozásával és az azt követő aggregációjával vannak összefüggésben. Az újabb tanulmányok azt mutatják, hogy a fémionok nemcsak a koordinációjuk révén, hanem a reaktív oxigént tartalmazó részecskék képződésének elősegítése miatt is hozzájárulnak az idegrendszeri betegségek kialakulásához.

A fémionok és a peptidek közötti kölcsönhatásnak két területen lehet jelentősége. (i) A fémionok peptidekhez való koordinációjának vizsgálata kutatócsoportunkban már több évtizedes múltra tekint vissza. (ii) Ugyanakkor a peptidek fémion-katalizált oxidációjának vizsgálata csak néhány évvel ezelőtt kezdődött el. A fehérjék fémion-katalizált oxidációja oldallánc-specifikus folyamat, amelyben a peptid fémkötőhelye oxidálódik.

Munkánk során a prion protein két különböző fémkötőhelyét – oktarepeaten belüli (PHAAA) és azon kívüli (GTHS) – egymáshoz közeli pozícióban tartalmazó modellpeptidet állítottunk elő. A vizsgált Ac-PHAAAGTHS-NH<sub>2</sub> peptid réz(II)ionokkal való kölcsönhatását, és rézkatalizált oxidációját vizsgáltuk. A képződő komplexek stabilitási állandóit pH-potenciometriás módszerrel határoztuk meg, a komplexek szerkezetének megállapításához UV-Vis spektrofotometriát és CD spektroszkópiát alkalmaztunk. A peptideket Cu(II)/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> és Cu(II)/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/aszorbinsav rendszerrel oxidáltuk. Az oxidáció előrehaladását HPLC-vel követtük, a keletkező termékeket ESI-MS és MS/MS módszerrel azonosítottuk.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projektek keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. Munkánkat az OTKA (K 115480 és K 124983) támogatta.



„AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA ÚNKP-17-4 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT”

### Prion fehérje fragmense és mutánsai oxidációs körülményeinek optimalizálása egy nonapeptiden keresztül

*Csire Gizella<sup>a</sup>, Bodnár Nikolett, Kállay Csilla<sup>b</sup>, Nagy Lajos<sup>c</sup>*

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

<sup>b</sup> MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

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

e-mail: csire.gizella@science.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, erősebb körülmények között pedig metionin-szulfon keletkezik [3].

A korábbi eredmények azt mutatták, hogy amennyiben Cu(II)/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> rendszerrel dolgozunk, abban az esetben a metionin oxidációja következik be és nem keletkezik 2-oxo-hisztidin származék. Az egy hisztidint tartalmazó Ac-SKPKTNAKHA-NH<sub>2</sub> ligandum oxidációja során a peptidlánc hasadása ment végbe.

A már elkezdett kutatások folytatásaként célul tűztük ki, hogy optimalizáljuk az oxidáció körülményét és ezzel minél több oxidált terméket tudjunk azonosítani. A kidolgozott módszer segítségével a prion fragmensek és mutánsaik oxidációját is tudjuk vizsgálni, amellyel az MCO neurodegeneratív betegségekben betöltött szerepére kereshetjük a választ.

A vizsgálatra szánt peptid az Ac-SPKTNMKHA-NH<sub>2</sub> ligandum, amely a humán prion fehérje fragmensének egyik mutánsa. Az oxidációhoz a Cu(II)/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> rendszeren kívül aszkorbinsavat is használtunk a reakcióelegyben, illetve kiterjesztettük a vizsgálatokat Fe(III)-ionra is. A korábbi eredményekhez hasonlóan Cu(II)/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> oxidatív környezetben csak a metionin oxidációja játszódott le. Ezt a rendszert kiegészítve aszkorbinsavval, már a hisztidin oxidációja is bekövetkezett és emellett számos más terméket is sikerült kimutatni.

[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 kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projektek keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. Munkánkat az OTKA (K 115480 és K 124983) támogatta.



„AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA ÚNKP-17-4 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT”

## N-terminális NColE7 metallonukleáz mutánsok DNS komplexeinek szerkezete – röntgenkristallográfiai vizsgálatok

*Fábián Zita<sup>a</sup>, Heidi A. Ernst<sup>b</sup>, Sine Larsen<sup>b</sup>, Németh Eszter<sup>a</sup>, Gyurcsik Béla<sup>a</sup>*

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

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

e-mail: fabianzit@gmail.com

A genomiális DNS kiválasztott helyen történő módosítása lehetőséget nyújthat genetikai betegségek kezelésére a sejtbeli DNS-javító mechanizmusok indukálásán keresztül. Az elmúlt években számos kutatás irányult mesterséges nukleáz enzimek kialakítására, melyek alkalmasak lehetnek ezen cél elérésére. Az eddig ismert mesterséges nukleázok azonban citotoxikusnak bizonyultak. Ezért szükség van egy olyan katalitikus hatású fehérje kifejlesztésére, amely szabályozott működésének köszönhetően csak specifikus DNS hasításra képes. A kutatócsoportunk által tervezett mesterséges cinkujj nukleázok alapjául a cinkiont tartalmazó Colicin E7 nukleáz doménje (NColE7) szolgált. Az NColE7 különleges tulajdonsága, hogy bár aktív központja a C-terminális végen található, a fehérje N-terminális részének jelentős szerepe van az enzim aktivitásában.

A mesterséges nukleázok tervezéséhez elengedhetetlen az egyes építőkövek, a katalitikus folyamat, valamint a szabályozási mechanizmusban résztvevő egyes aminosavak teljes körű ismerete. A szerkezetileg fontos N-terminális aminosavak tanulmányozása céljából mutáns NColE7 fehérjéket állítottunk elő, ám csoportunk eddigi eredményei alapján ezek pontos funkciója még nem ismert. A C-terminális katalitikus központtal kölcsönhatást kialakító N-terminális aminosavak szerepének megértése érdekében a kialakított mutáns fehérjék DNS-sel alkotott komplexeinek szerkezetét röntgenkristallográfiával vizsgáltuk.

### Köszönetnyilvánítás:

Dániai rövid tanulmányútjaimat a Tempus Közalapítvány támogatta.



Az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-17-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

### NColE7 és C127 fehérjék szerkezetének NMR spektroszkópiás vizsgálata

*Hermann Enikő<sup>a</sup>, Czene Anikó<sup>a</sup>, Weber Edit<sup>b</sup>, Hetényi Anasztázia<sup>b</sup>, Martinek Tamás<sup>b</sup>,  
Gyurcsik Béla<sup>a</sup>*

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

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszeranalitikai Intézet

e-mail: eniko.hermann@gmail.com

A Colicin E7 fehérje nukleáz doménjének (NColE7) katalitikus központja annak C-terminális részén található. Ennek ellenére, ha a nukleáz N-terminális aminosavait módosítjuk, vagy eltávolítjuk, a fehérje katalitikus aktivitása jelentősen lecsökken, vagy akár teljes mértékben el is veszik. Ez lehetőséget ad a fehérje allosztérikus szabályozására, és ezáltal új, biztonságosan alkalmazható NColE7-alapú mesterséges nukleázok előállítására. [1]

Az N-terminális aminosavak szerepének jobb megismerése és az oldatbeli szerkezet felderítése érdekében az NColE7-et, és N-terminálison négy aminosavval csonkított C127 ( $\Delta$ N4-NColE7) mutánsát NMR spektroszkópia segítségével vizsgáltuk. Ehhez elsőként <sup>13</sup>C és <sup>15</sup>N izotópokban dúsított fehérjét kellett előállítanunk és tisztítanunk. A fehérjéket baktériumsejtekben fejeztük ki, ún. minimál tápoldatban, majd többlépéses ioncsere-kromatográfiás eljárással tisztítottuk azokat. Ezt követően felvettük az enzimek két-, és háromdimenziós NMR-spektrumait, és elvégeztük azokban a jelek hozzárendelését. Ennek segítségével meghatároztuk a fehérjék valószínűsíthető oldatbeli másodlagos szerkezetét a fehérjelánc egyes szakaszaira, és összehasonlítottuk ezt az ismert röntgenkristallográfiás szerkezetekkel és egymással is. Kísérleteket végeztünk továbbá abból a célból, hogy stabilis fehérje-DNS komplexeket állítsunk elő további NMR-spektroszkópiás vizsgálatokhoz.

[1] Anikó Czene, Eszter Németh, István Gyöző Zóka, Noémi. I. Jakab-Simon, Tamás Körtvélyesi, Kyosuke Nagata, Hans E. M. Christensen, Béla Gyurcsik, *J. Biol. Inorg. Chem*, **2013**, 18(3), 309-21.

**Köszönetnyilvánítás:**  AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA UNKP-17-2 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT

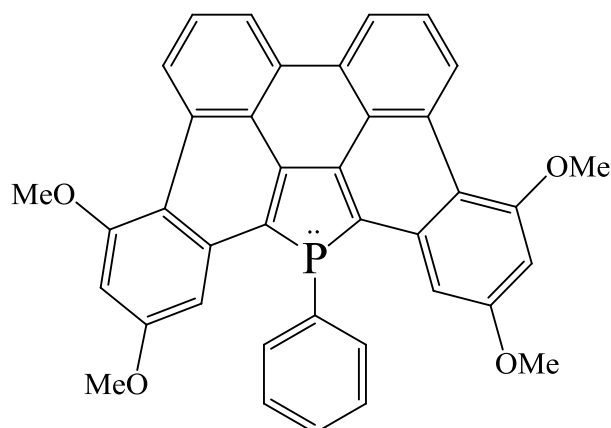
## Foszfor módosított PAH komplexek UV spektruma

Szűcs Rózsa<sup>a</sup>, Pierre-Antoine Bouit<sup>b</sup>, Muriel Hissler<sup>b</sup>, Nyulászi László<sup>a</sup>

<sup>a</sup> BME Szetvetlen és Analitikai Kémia Tanszék; MTA-BME Számítások Vezérelte Kutatócsoport

<sup>b</sup> Institute of Chemical Science University Rennes 1, France  
e-mail: nyulaszi@mail.bme.hu

A policiklusos aromás szénhidrogének kiterjedt konjugált  $\pi$ -rendszerüknek köszönhetően gyakran érdekes optikai tulajdonságokkal rendelkeznek, s mindez heteroatomok bevitelével tovább módosítható. A jelen előadásban az ábrán látható foszforral módosított PAH ligandummal alkotott átmenetifém-komplexek spektroszkópiai sajátosságait vizsgáljuk.



A látható tartományban elnyelést illetve fluoreszcenciát mutató, Au, Re, Cu és Pd komplexek spektruma TD DFT számításaink szerint alapvetően a ligandumra jellemző sávokat mutat. A mért és a számított spektrumok összevetése alapján a két ligandumot tartalmazó komplexek szerkezetéről kapunk információt [1].

[1] F. Riobé, R. Szűcs, C. Lescop, R. Réau, L. Nyulászi, P.-A. Bouit, M. Hissler, *Folyóirat (Times Organometallics)*, **2017**, 36, 2502.

**Köszönetnyilvánítás:** OTKA K 105417, és COST CM10302 (SIPS)

## Magnézium(II)-glükonát komplexek semleges és lúgos vizes oldatokban

*Kutus Bence<sup>a</sup>, Dudás Csilla<sup>a</sup>, Sipos Pál<sup>a</sup>, Pálinkó István<sup>b</sup>, Peintler Gábor<sup>c</sup>*

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

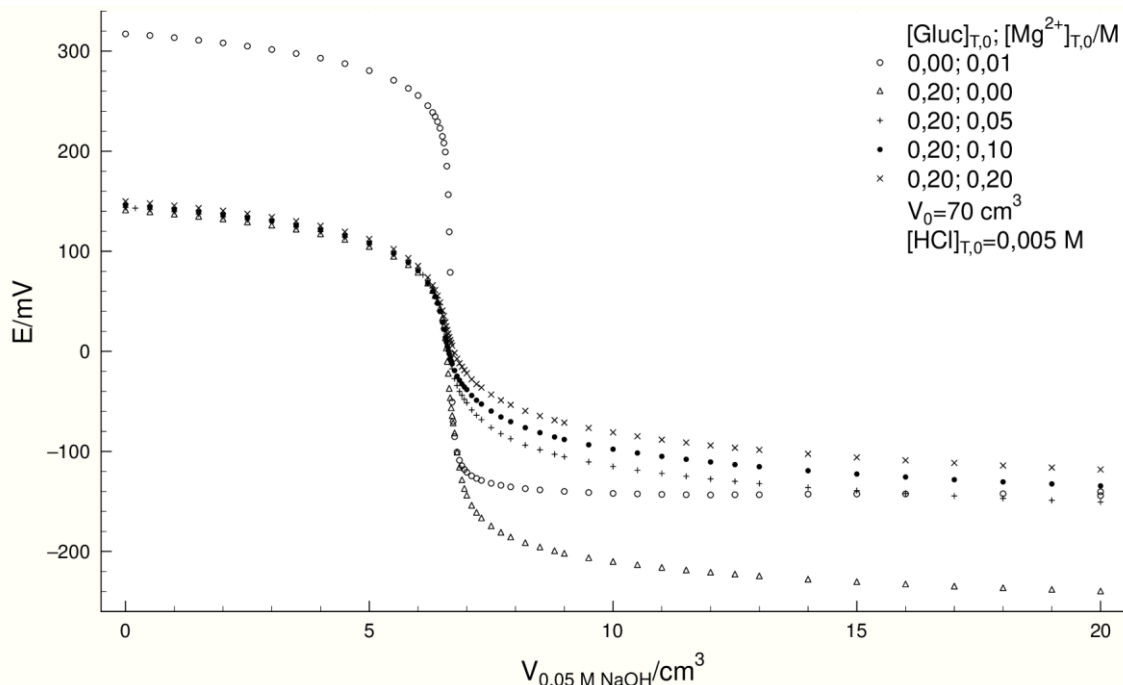
<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

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

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

Kutatócsoportunkban a kalcium- és glükonátiont tartalmazó oldatok összetételét részletesen tanulmányoztuk, főleg nagy ionerősségeknél [1]. Ennek a munkának természetes folytatása, hogy hasonló vizsgálatokat végzünk a Ca(II)-t Mg(II)-ra cserélve. A 4 M ionerősségen végrehajtott potenciometriás, <sup>1</sup>HNMR és <sup>13</sup>CNMR vizsgálatok alapján a következő, az előadásban részletezett és alátámasztott megállapításokat tehetjük:

1. A komplexképződés mértéke a Mg(II)-tartalmú oldatokban lúgos közegben nagyobb, mint a Ca(II) esetében. Az alábbi ábra jól szemlélteti a komplexképződés hatását a potenciometriás görbékre állandó glükonát- és növekvő MgCl<sub>2</sub> koncentráció mellett:



2. A két fémion esetén hasonló összetételű komplexek képződnek.
3. Az NMR mérések segítségével különbséget lehet tenni között, hogy a deprotonálódás a ligandum hidroxil csoportjain vagy a fémionhoz koordinálódó vízmolekulákon következik be.

[1] Pallagi et al., *Environmental Science & Technology*, **2014**, *48*, 6604–6611.



## A NiSOD enzim fémkötő szakaszának vizsgálata

*Lihi Norbert<sup>a</sup>, Pataki Balázs<sup>b</sup>, Csire Gizella<sup>b</sup>, Szakács Bence<sup>b</sup>, Várnagy Katalin<sup>b</sup>,  
Sóvágó Imre<sup>b</sup>, Fábíán István<sup>a,b</sup>*

<sup>a</sup> MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

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

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

A prokarióta sejtekben megjelenő szuperoxid gyökanion lebontását a nikkellal tartalmozó szuperoxid dizmutáz enzim is végzi. A homohexamer felépítésű metalloprotein N-terminális régiója olyan konszenzus peptidszekvenciát tartalmaz (HisCysXaaXaaProCysXaaXaaTyr...), amely mind a fémmel megkötéséért, mind pedig a dizmutálási reakcióért egyaránt felelős. A szuperoxid gyökanion bontása során a nikkellal +2-es és +3-as oxidációs állapotú formákat vesz fel, amelyben spinállapota és koordinációs geometriája egyaránt megváltozik.

Munkánk során három, az N-terminális régiót modellező peptidet (HCA-NH<sub>2</sub>, HCDL-NH<sub>2</sub> és Ac-HCDLPCGVY-NH<sub>2</sub>), illetve a natív enzim 1-9 aminosavból felépülő egységét (HCDLPCGVY-NH<sub>2</sub>) vizsgáltuk klasszikus oldategyensúlyi és spektroszkópiai módszerekkel széles pH-tartományban. A nikkellal(II)ionok komplexképződési folyamatai mellett vizsgáltuk cink(II)ionokkal alkotott komplexeket is, ugyanis utóbbi hasonló hard-soft tulajdonsága miatt könnyen képez nagy stabilitású komplexeket tiolátcsoportot tartalmazó ligandumokkal.

Eredményeink alapján az enzimre jellemző aktív szerkezet már pH > 6 felett kialakul az (NH<sub>2</sub>, N<sup>-</sup>, S<sup>-</sup>, S<sup>-</sup>) donorcsoportok kötődése által. Ezt a fajta koordinációs módot sikeresen azonosítottuk MS/MS körülmények között is. Az N-terminálisan védett peptid nikkellal(II)ionokkal kisebb stabilitású komplexeket képez, mint a cink(II)ionokkal. Így az N-terminális aminocsoport szerepe elengedhetetlen a nikkellal(II) megkötése és az enzim aktív funkciójának betöltése szempontjából.

**Köszönetnyilvánítás:** A munka az NKFIH (K 124983 és K 115480) anyagi támogatása mellett a GINOP-2.3.2-15-2016-000 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

## Kinetics and mechanism of epoxidation of olefins by chiral tetrapyridyl oxoiron(IV) complex

*Bashdar I. Meena, Balázs Kripli, Gábor Speier, József Kaizer*

University of Pannonia, Organic Department, H-8200 Veszprém

e-mail: bashdarismael@gmail.com

The oxidation of organic substrates is fundamental to contemporary synthetic chemistry and there continues to be a demand for new and efficient catalytic methods to effect region and stereoselective oxidative transformations [1]. In recent studies it has been shown that the polypyridyl complexes of iron are coordinatively stable both in higher and lower oxidation states, and a variety of polypyridyl complexes of oxoiron(IV) are reportedly known to be effective stoichiometric oxidants toward oxidation of various organic substrates via oxygen atom transfer (OAT) [2].

The reactivity of the previously reported low-spin (S=1) oxoiron(IV) complex,  $[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{asN4Py})(\text{O})]^{2+}$  with chiral pentadentate ligand, asN4Py (asN4Py = N,N-bis(2-pyridylmethyl)-1,2-di(2pyridyl)ethylamine), has been investigated in the oxidation reaction of various alkenes such as cis-cyclooctene and styrene derivatives. A linear free-energy relationship between the second-order rate constants ( $k_2$ ) for the para-substituted styrene oxidations and the total substituent effect (TE) parameters has been established = +0.19. A comparison of this correlation for the corresponding oxoruthenium(IV) mediated epoxidation reactions has revealed that the oxidation of aromatic alkenes mediated by the complex proceeds via the rate-limiting formation of a benzylic radical intermediate in a nonconcerted process. Based on these results above, similar mechanism with radicaloid intermediates can be proposed for other cyclic and acyclic alkenes. Also enantioselectivities for the oxidation of styrene derivatives have been studied.

[1] M.C. White, A.G. Doyle, E.N. Jacobsen, *J. Am. Chem. Soc.*, **2001**, 123, 7194.

[2] D. Lakk-Bogáth, G. Speier, J. Kaizer, *New. J. Chem.*, **2015**, 39, 8245.

**Acknowledgements:** We thank the Hungarian Research Fund (OTKA) K108489 for support.

## Egy antracén-tartalmú tripodális ligandum: oldategyensúly, fluoreszcencia, hidrolízis

*Matyuska Ferenc<sup>a</sup>, Tréfás Tamás<sup>a</sup>, Nagy Nóra Veronika<sup>b</sup>, Gajda Tamás<sup>a</sup>*

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

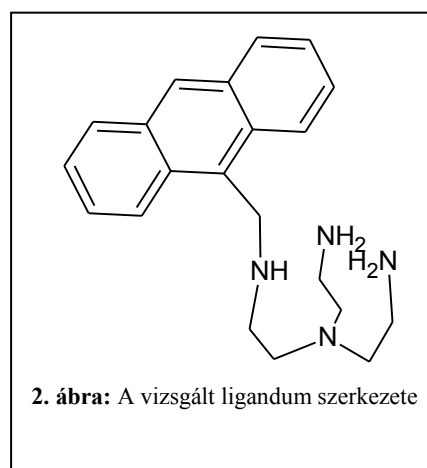
<sup>b</sup> MTA TTK, Kémiai Krisztallográfiai Kutatócsoport

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

Kondenzált aromás gyűrűket tartalmazó molekulák számos érdekes sajátossággal bírnak. Ezek közül fontos a fluoreszcencia jelensége, valamint hogy  $\pi$ -stacking kölcsönhatásokat képesek kialakítani hasonló rendszerekkel, és ezeken keresztül képesek például a DNS láncba interkalálódni. A ligandumok fluoreszcencia spektruma fémionok koordinációjának hatására gyakran megváltozik, ami felhasználható a fémionok koncentrációjának kimutatására. Ugyanakkor az interkaláció lehetőséget biztosít arra, hogy katalitikus aktivitással bíró fémkomplexek erősen kötődjenek pl. a DNS-hez.

A tripodális ligandumok preorganizált, csatolt kelátgyűrűket tartalmazó kötőhelyet biztosítanak a fémionok számára, így nagy termodinamikai stabilitással bíró komplexeket képeznek. Amennyiben egy ilyen platformot építünk tovább egy fluorofór csoporttal, fémion-érzékelésre vagy DNS hidrolitikus hasítására alkalmas komplexeket képezhetünk. A trisz-2-aminoetilamin vagy tren megfelelő platform lehet erre a célra, így ezt egy antracén csoporttal bővítettük, így kaptuk az előadás témáját jelentő ligandumot (1. ábra).

A ligandum komplexképző sajátosságát vizsgáltuk vizes közegben réz(II)- és cink(II)-ionok jelenlétében. Eredményeink nagy stabilitású, 4N-es, trigonális bipiramis szerkezetű komplexek képződésére utalnak. Vizsgáltuk a komplexek fluoreszcencia sajátosságait, cink(II) jelenlétében oldószertől függő mértékű intenzitásnövekedést tapasztaltunk. Vizsgálataink alapján pH = 7-10 között mind a réz(II)-, mind a cink(II)-komplexek képesek a DNS hidrolitikus hasítására.



**Köszönetnyilvánítás:** Intelligens fémvegyületek GINOP-2.3.2-15-2016-00038

### Etelka, Hidroxámsavak, Debrecen és egyéb bohóságok – Emlékek

*Kiss Tamás*

Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

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

46 évet töltöttem Debrecenben, ebből 28 évet a Kossuth Lajos Tudományegyetemen és közel 26 évet a Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszéken, diákkörös hallgatótól kezdve egyetemi tanári beosztásig. Ezen időszak egy jelentős részét Etelkával egy dolgozószobában, sokszor más társakkal megosztva töltöttük el. Szakmailag is volt több-kevesebb együttműködés közöttünk, elsősorban a hidroxámsavak és az aminoszulfonátok kémiájában, egészen a kilencvenes évek közepéig, 1996-ig, amikor is én a József Attila Tudományegyetem társtanszékére távoztam. Ezt követően PhD-seink Enyedy Éva és Buglyó Péter révén folytatódott szakmai együttműködésünk. Emberi kapcsolatunk viszont azóta is töretlen, engem sok-sok szál fűz Debrecenhez, a Komplexkémiai Csoportoz.



Előadásomban, némi szakmai elemekkel fűszerezve ezekről az emlékeimről szólok megpróbálva így módon is bemutatni Farkas Etelka szakmai és szakma-társadalmi tevékenységét és képet festeni Etelkáról, mint munkatársról.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönetemet fejezem ki a DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék komplexkémikusainak ezen előadás összeállításában nyújtott segítségükért és a körükben eltöltött felejthetetlen évekért, mely felöleli fiatalságom jórészét.

## Újabb eredmények és tervek a várhatóan hipoxia-aktivált kobalt(III) komplexek előállítására és vizsgálatára témakörben

Buglyó Péter

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: buglyo@science.unideb.hu

A kobalt két jelentős oxidációs állapotát tartalmazó komplexek eltérő termodinamikai stabilitása, kinetikai viselkedése, a Co(II) és Co(III) különböző donoratom-preferenciája elvi lehetőségét biztosítja olyan vegyületek kifejlesztésének, amelyek a rákos szövetek redukívabb környezetében szelektíven redukálódva fejthetnek ki antitumor hatást.

Kutatócsoportunkban ezen a területen olyan hipoxia-aktivált, inert, vegyes ligandumú kobalt(III) komplexek tervezése, szintézise és vizsgálata a cél, amelyek vagy önmagukban is biológiailag aktív kelátképzőt tartalmaznak, vagy olyan ambidentát ligandumot, amely segítségével kétfémes komplexek hozhatók létre félszendvics szerkezetű platinafémionok beépítésével.

Korábbi eredmények azt mutatták, hogy a 6N donor környezet a Co(III) míg a 6O donor környezet a Co(II) oxidációs állapotot stabilizálja, míg elsősorban a 4N+2O donoratomok biztosítanak biológiai szempontból releváns redukációs potenciált az oktaéderes Co(III) komplexeknek. Ezen a vonalon viszonylag nagy számú, 4N donorként tripodális tetramint és (bio)molekulát tartalmazó komplexet állítottak elő.

Kapcsolódva ezekhez a kutatásokhoz kimutattuk, hogy az O,O donor molekula (pl. hidroxamát) funkcionálisítása, a 4N donor jellege (alifás vagy aromás) illetve a kialakuló kelát mérete lehetővé teszi a vegyes ligandumú Co(III) komplexek redoxi sajátságainak finomhangolását [1].

Az előadás áttekintést fog nyújtani a területen folyó jelenlegi munkáról, a legújabb eredményekről és a további tervekről.

[1] P. Buglyó, I. Kacsir, M. Kozsup, I. Nagy, S. Nagy, A. Cs. Bényei, É. Kováts, E. Farkas, *Inorg. Chim. Acta*, **2018**, *472*, 234-242.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA (K112317) anyagi támogatása mellett a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valamint az OTKA támogatásával (K112317) valósult meg.

### A patkány amilin peptid fragmenseinek átmenetifém komplexei

*Várnagy Katalin, Dávid Ágnes*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

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

Az amilin egy 37 aminosavból álló polipeptid, biológiai szerepe a vércukorszint szabályozásához köthető. A II. típusú cukorbetegség során a hasnyálmirigyben az amilin peptidláncának aggregációja következik be. Régóta tudják azonban, hogy ez alapvetően a fehérjemolekulák konformációváltozásával van kapcsolatban, melyben egyes fémionoknak (Cu(II)-, Zn(II)- és Ni(II)-ion) is szerepe lehet.

A patkány amilinjé azonban nem mutat hajlamot ilyen plakkok képzésére. A humán és a patkány amilin szekvenciája között a legfontosabb különbség az, hogy a patkány amilinjé nem tartalmazza az ismert horgonycsoportokat (terminális aminocsoport, His), mégis azt találták, hogy a 13-tagú fragmense (rIAPP(17-29)) képes megkötni a Cu(II)-iont. A kisebb tagszámú fragmensek és mutánsaik további szisztematikus vizsgálata alapján az is egyértelművé vált, hogy az –SSNN– szekvencia jelenti a kötőhelyet a Cu(II)-ion számára és ezen belül az aszparagin oldallánc az elsődleges horgonycsoport. [1,2] Ahhoz, hogy pontosabb képet kapjunk az –SSNN– szekvencia és az aszparagin oldallánc koordinációs szerepéről, vizsgálatainkat a szabad N-terminusú peptidek nikkell(II) és cink(II) komplexeinek oldategyensúlyi oldategyensúlyi jellemzésével egészítettük ki. [3]

A három fémion komplexeire kapott eredményekből arra következtethetünk, hogy bár az –SSNN– szekvencia a nikkell(II)ion számára is erősebb kötőhelyet jelent, mint egy egyszerű oligopeptid, kiugró stabilitással a réz(II)iont képes megkötni. Miután ez a humán amilintól eltérő fémion kötőhelyet jelent, ez szerepet játszhat a kétféle fehérje eltérő aggregációs viselkedésében.

[1] Cs. Kállay, Á. Dávid, S. Timári, E. M. Nagy, D. Sanna, E. Garribba, G. Micera, P. De Bona, G. Pappalardo, E. Rizzarelli, I. Sóvágó, *Dalton Trans.* **2011**, 40 (38), 9711 – 9721.

[2] Á. Dávid, C. Kállay, D. Sanna, N. Lihi, I. Sóvágó, K. Várnagy, *Dalton Trans.*, **2015**, 44, 17091-17099.

[3] Á. Dávid, É. T. Hartman, N. Lihi, I. Sóvágó, K. Várnagy, *New J. Chem.*, DOI: 10.1039/C7NJ04605G.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az NKFIH K115480 számú pályázatának támogatásával, valamint a GINOP-2.3.-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával készült.

## Nemesfém kolloidok: elektrokatalizátorok és optikai szenzorok fejlesztése

*Csapó Edit<sup>a,b</sup>, Ungor Ditta<sup>b</sup>, Juhász Ádám<sup>a,b</sup>, Ahmed Mohsen Ismail<sup>a</sup>*

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

<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, Orvosi Vegytani Intézet

e-mail: juhaszne.csapo.edit@med.u-szeged.hu

Az elmúlt évtizedben a nanoszerkezetű anyagok előállítása és szerkezetvizsgálata, számos tudományterületen való alkalmazhatóságuknak köszönhetően, az egyik legdinamikusabban fejlődő kutatási területté vált, melyet az új tudományos publikációk számának évről évre történő rohamos növekedése is igazol. A nanoszerkezetű anyagokon belül különösen a nemesfémek azok, amelyeket egyedi elektromos, mágneses és optikai tulajdonságaiknak köszönhetően az elektronikától a katalízisen át a gyógyászatig számos tématerületen intenzív érdeklődés kísér. Az arany nanorészecskék és nanoklaszterek méretükkel és szerkezetükkel hangolható egyedi optikai (plazmonikus és fluoreszcens) tulajdonsággal rendelkeznek, ami lehetővé teszi optikai bioszenzorként való lehetséges alkalmazásukat, de a tömbfázishoz képest megnövekedett fajlagos felületük következtében katalizátorok alapjait is képezhetik. A biokompatibilis nemesfém nanorészecskék és nanoklaszterek nagy kinetikai stabilitást mutatnak fiziológiás közegben, ami lehetővé teszi alkalmazásaikat orvos diagnosztikai és terápiás felhasználásokban.

Fémionok és biomolekulák szelektív detektálásának megvalósítása érdekében munkánk során nukleotiddal- és fehérjével-stabilizált fluoreszcens arany nanoklasztereket állítottunk elő vizes közegben. Szerkezetüket fizikai-kémiai mérés technikákkal jellemeztük, majd a kioltás jellegének és mechanizmusának tanulmányozására hőmérsékletfüggő fluoreszcencia kioltási vizsgálatokat végeztünk. Mindezekon felül, változó összetételű kétfémes ötvözet nanorészecskék méretszabályozott szintézisét is megvalósítottuk, melyeket sikeresen használtunk elektrokatalizátorok fejlesztéséhez. Az eredmények az előadásban kerülnek bemutatásra.

[1] D. Ungor, E. Csapó, B. Kismárton, Á. Juhász, I. Dékány, *Coll. Surf. B.* **2017**, *155*, 135-141.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatási munka a K116323 OTKA és a GINOP-2.3.2-15-2016-00038 kutatási pályázatok támogatásával készült.

## 8-Hidroxi-kinolin- és 2-pikolinsav-származékok fémorganikus félszendvics komplexeinek oldatkémiai vizsgálata

*Enyedy Éva A.<sup>a</sup>, Dömötör Orsolya<sup>a</sup>, Jelena M. Poljarevic<sup>a</sup>, Mészáros János P.<sup>a</sup>, May Nóra V.<sup>b</sup>, Gál Tamás G.<sup>b</sup>, Szatmári István<sup>c</sup>, Fülöp Ferenc<sup>c</sup>, Spengler Gabriella<sup>d</sup>*

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

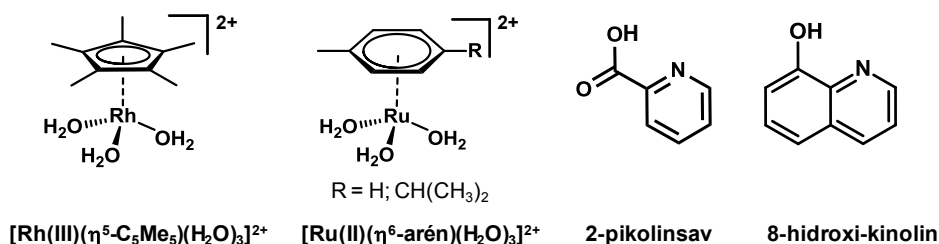
<sup>b</sup> MTA-TTK, Műszercentrum, Kémiai Krisztallográfia Kutatólaboratórium

<sup>c</sup> Szegedi Tudományegyetem, GYTK, Gyógyszerkémiai Intézet

<sup>d</sup> Szegedi Tudományegyetem, ÁOK, Orvosi Mikrobiológiai és Immunbiológiai Intézet

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

A rákellenes fémkomplexek fejlesztése és hatékonyságuk optimalizálása egyértelműen igényli azok fizikai-kémiai tulajdonságainak minél szélesebb körű megismerését. Az utóbbi évtizedekben számos példát láthatunk az irodalomban félszendvics fémorganikus ruténium- és ródiumkomplexek előállítására, valamint *in vitro* és *in vivo* vizsgálataira [1]; oldatkémiai jellemzése azonban az ilyen típusú komplexeknek meglehetősen hiányos.



Jelen előadásban változatos módon szubsztituált (O,N) donoratomokat tartalmazó 2-pikolinsav és 8-hidroxi-kinolin típusú ligandumok  $[\text{Rh(III)}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ ,  $[\text{Ru(II)}(\eta^6\text{-}p\text{-cimol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$  és  $[\text{Ru(II)}(\eta^6\text{-toluol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$  fémorganikus kationokkal képzett komplexeinek oldategyensúlyi vizsgálataival kapott eredményeinket mutatjuk be. A komplexek lipofilitásának, oldatbeli stabilitásának, a  $\text{H}_2\text{O}/\text{Cl}^-$ -csere egyensúlyi folyamatainak jellemzése mellett, bemutatjuk szilárd fázisú szerkezetüket és citotoxicitásukat különböző humán rákos sejtvonalakon mérve. Alapvetően arra a kérdésre keressük a választ, hogy az oldatkémiai tulajdonságok hogyan befolyásolják a komplexek biológiai aktivitását.

[1] B.S. Murray et al., *Coordination Chemistry Reviews*, **2016**, 306, 86.

**Köszönetnyilvánítás:** GINOP-2.3.2-15-2016-00038, NKFIA FK 124240, UNKP-17-4, UNKP-17-3



## Egy új PC2A-származék, mint lehetséges „intelligens” MRI-kontrasztanyag: szintézis és jellemzés

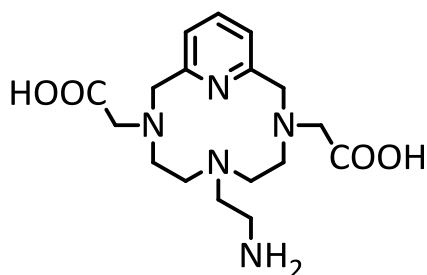
*Botár Richárd<sup>a</sup>, Kálmán Ferenc Krisztián<sup>b</sup>, Tóth-Molnár Enikő<sup>a</sup>, Tircsó Gyula<sup>a</sup>*

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

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

e-mail: botar.richard@science.unideb.hu

A mágneses rezonanciás képalkotás (MRI) az egyik leggyakrabban alkalmazott technika az orvosi diagnosztikában, segítségével fel tudunk állítani non-invazív kórképeket. Az MRI manapság nem csak az anatómiai elváltozások feltérképezésében hasznos, hanem úgynevezett „intelligens” kontrasztanyagok segítségével lehetőség nyílik a szervezet fizikai-kémiai paramétereinek mérésére is (pl. pH, hőmérséklet, ionok koncentrációjának meghatározása).<sup>[1]</sup>



**1. ábra:** A ligandum szerkezete.

Munkám során a PC2A-EA ligandum (1. ábra) szintézisére és komplexei koordinációs kémiai jellemzésére került sor. pH-potenciometriás titrálások segítségével meghatároztuk a ligandum protonálódási és néhány, eszenciális fémionnal kialakuló komplexének protonálódási és stabilitási állandóját is. A [Mn(PC2A-EA)]-komplex stabilitási állandója  $\log K_{MnL}=19,01$  adódott. <sup>1</sup>H-relaxometírás módszer

segítségével meghatároztuk a Mn(II)-komplex relaxivitását ( $r_{1p}= 2,22 \text{ mM}^{-1}\text{s}^{-1}$ , pH=7,4) és vizsgáltuk annak pH-függését is. A kinetikai vizsgálatokból az is kiderült, hogy a Mn(II)-komplex disszociációjának felezési ideje ( $t_{1/2}$ ) 25 °C-on és fiziológiás pH-n 8054 óra. Az eredményeket tekintve kijelenthető, hogy a komplex jó termodinamikai és kinetikai tulajdonságokkal rendelkezik, és fiziológiás tartományban (pH=6,0-8,0 között) a relaxitás értéke csaknem másfél egységet változik, ami jó pH-szenzitív ágenssé teszi az *in vivo* alkalmazás szempontjából.

[1] A. E. Merbach, L. Helm and E. Tóth. The Chemistry of Contrast Agents in Medical Magnetic Resonance Imaging, ed. John Wiley & Sons, Chichester, Second Edition, 2013

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A vizsgálatainkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 sz. pályázata, a Magyar Tudományos Akadémia (Bolyai János Kutatói Ösztöndíj) támogatta.

### Deferasirox-tartalmú komplexek szintézise és szerkezetvizsgálata

*Nagy Imre*<sup>a</sup>, *Nyujtó Nikolett*<sup>a</sup>, *Ferenczik Gergő*<sup>a</sup>, *Bényei Attila*<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, Fizikai Kémiai Tanszék

e-mail: nagyimre@science.unideb.hu

A rákos sejtek vasfelvétele nagyobb és környezetük redukтивabb, mint az egészséges sejteké, mely lehetőséget teremthet szelektív tumorellenes szerek kifejlesztésére. A daganatos betegségek gyógyítására használt készítmények ugyanis gyakran az egészséges sejteket is károsítják. A deferasirox a vasfelhalmozódásos betegek kezelésére széles körben használt (O,N,O) donoratomokat tartalmazó kelátképző [1], melynek rákellenes hatása is ismert. Kimutatták, hogy pikkelyes karcinóma sejtek esetén csökkenti a sejtburjánzást, és sejthalált idéz elő.[2] A deferasirox nyelőcsőrák esetén *in vitro* és *in vivo* is mutat sejtosztódást gátló hatást, valamint csökkenti a tumor méretét.[3] A közelmúltban titán komplexével történtek vizsgálatok, ahol megállapították, hogy a  $[Ti^{IV}(\text{deferasirox})_2]^-$  a sejtben disszociál, a szabad ligandum Fe(III) ionokat képes megkötni, míg a felszabaduló Ti(IV) rákellenes hatást fejthet ki. Bár a fent említett komplex gátolja a rákos sejtek osztódását és növekedését, a szelektivitása csekély.[4]

Munkánk során két új, vízben jól oldódó deferasirox származékot állítottuk elő és ezek, valamint a deferasirox Co(III) és Ru(III) komplexeit. Azt feltételezzük, hogy a rákos sejtekben történő szelektív redukciójuk a disszociációjukat okozhatja, mely során lehetővé válik a felszabaduló deferasirox vas-megkötése révén a tumorsejtek életfolyamatainak lassítása és gátlása továbbá a ruténium is kifejtheti citotoxikus hatását. Az előadás az elért eredményeket mutatja be.

[1] J.L. Stumpf, *Amer. J. Health-System Pharmacol.* (64) 606-616, (2007)

[2] J.C. Lee, K.C. Chiang, T.H. Feng Y.J. Chen, *Int. J. Mol. Sci.* (17) 1435-1448, (2016)

[3] S.J. Ford, P. Obeidy, D.B. Lovejoy, M. Bedford, L. Nicols, *British J. Pharmacol.* (168) 1316-1328 (2013)

[4] M. R. Maurya, B. Sarkar, F. Avecilla, S. Tariq, A. Azam, I. Correia, *Eur. J. Inorg. Chem.* 1430-1441, (2016)

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2.-15-2016-00008 és a GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projektek keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valamint az OTKA támogatásával (K112317) valósult meg.

## Flavonoid származékok kölcsönhatása réz(II)ionokkal

*Szorcsik Attila<sup>a</sup>, Bezzeg Eszter<sup>b</sup>, Hunyadi Attila<sup>b</sup>, Nagy Nóra Veronika<sup>c</sup>, Gajda Tamás<sup>a</sup>*

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

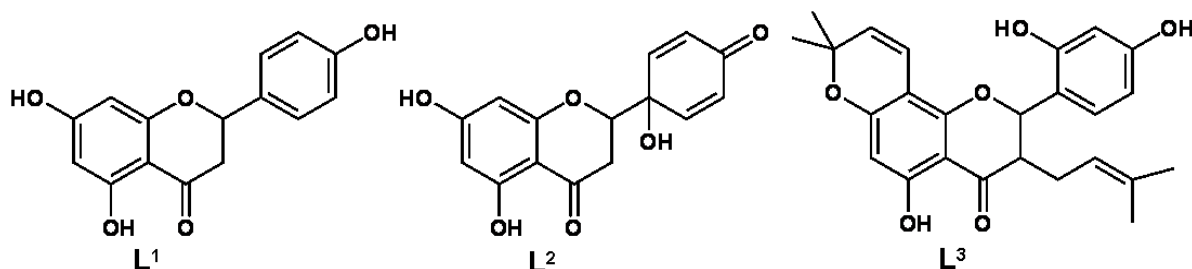
<sup>b</sup> Szegedi Tudományegyetem, Farmakognóziai Intézet

<sup>c</sup> MTA-TTK, Kémiai Krisztallográfia Kutatólaboratórium

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

A flavonoidok az emberi szervezetben igen széleskörű kémiai és biológiai aktivitást mutatnak. Nagy mennyiségben megtalálhatók a naponta fogyasztott élelmiszereinkben, hatásukat az A- és C-vitaminnal, valamint a tokoferollokkal együttesen fejtik ki. A flavonoidok jelentős farmakológiai hatással rendelkeznek, az apigeninnek leírták többek közt antioxidáns, gyulladáscsökkentő, antidiabetikus és kemopreventív hatását, a protoapigenon xantin-oxidáz gátló, antiproliferatív, a moruszin pedig tirozináz inhibitor hatással rendelkezik. A flavonoidok antioxidáns hatása komplexképző tulajdonságukkal hozható összefüggésbe, ugyanakkor számos irodalomban számoltak be fokozottabb tumorelles hatásokról a komplexképződést követően. A közleményekben általában domináns az eredmények orvosi-életteni megközelítése, nagymértékben hiányoznak az egyensúlyi folyamatok kvantitatív leírására, illetve a koordinációs helyek megállapítására tett bizonyító kísérletek.

Jelen munkánkban három flavonoid származék (1. Ábra) réz(II)komplexeinek oldatkémiai vizsgálatáról számolunk be.



1. ábra: A vizsgált három flavonoid származék sematikus szerkezete (L<sup>1</sup> = Apigenin, L<sup>2</sup> = Protoapigenon, L<sup>3</sup> = Moruszin)

**Köszönetnyilvánítás:** A munkát az GINOP-2.3.2-15-2016-00038 pályázat támogatta.

## Cu(I)ionok hatékony megkötésére alkalmas $\beta$ -turn motívumot és két ciszteint tartalmazó tetrapeptid

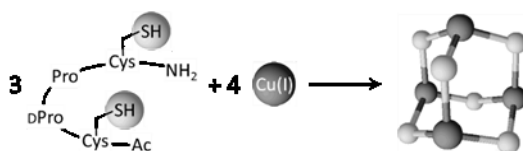
*Mesterházy Edit<sup>a,b</sup>, Colette Lebrun<sup>a</sup>, Jancsó Attila<sup>b</sup>, Pascale Delangle<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> CEA Grenoble/Université Grenoble Alpes/CNRS INAC, SyMMES, CIBEST

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

e-mail: medit0715@gmail.com

A réz az egyik legfontosabb nyomelem, mely elsősorban redox enzimek kofaktoraként található meg vegyértékváltó tulajdonságának köszönhetően. A sejtekben uralkodó redukzív környezet következtében a hozzáférhető réz Cu(I) formában van jelen, amely azonban képes reaktív oxigén részecskék generálására, ezért koncentrációja szigorú szabályozás alatt áll. Egyes betegségek, mint például a Wilson-betegség során felborul a szervezet réz egyensúlya, így az felhalmozódhat egyes szervekben.



Előadásom során egy olyan merev szerkezetű tetrapeptid Cu(I) koordinációs tulajdonságait mutatom be, melyben két ciszteint a  $\beta$ -turn kialakítására képes DPro-Pro motívum köt össze (CDPPC). A peptid Cu(I)ionokkal való titrálását UV- és CD-spektroszkópiával követve mindkét módszerrel jellegzetes LMCT[1] sávok megjelenését figyeltük meg, melyek intenzitása lineárisan növekedett az 1,3/1 Cu(I)/peptid aránynál tapasztalt éles töréspontig. Az eredmények alapján feltételezett Cu<sub>4</sub>S<sub>6</sub> típusú részecske jelenlétét ESI-MS és DOSY NMR mérésekkel bizonyítottuk, melyek egyértelműen a Cu<sub>4</sub>L<sub>3</sub> összetételű klaszter képződését mutatták. A komplex látszólagos stabilitási állandóját kompetíciós vizsgálatokkal határoztuk meg, mely a ligandum kiemelkedő Cu(I)-kötő affinitását mutatta fiziológias pH-n.

Eredményeink azt mutatják, hogy a peptid szerkezete alkalmas a Cu(I)-komplex összetételének kontrollálására és egy nagy stabilitású, jól definiált összetételű, vízdoldható Cu<sub>4</sub>L<sub>3</sub> klaszter kialakítására.

[1] P. Faller et al., *Biochemistry*, **1997**, *36*, 13341-13348

## Hidroxi- és oxokarbonsavak kalciumkomplekképző sajátosságai semleges és lúgos oldatokban

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

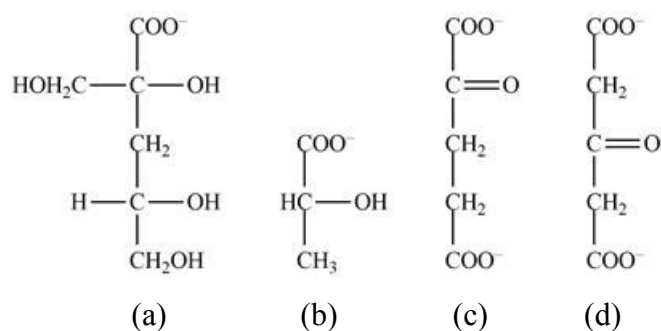
<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

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

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

e-mail: dudas.csilla@chem.u-szeged.hu

A hidroxi- és oxokarbonsavak mind környezetvédelmi, mind ipari szempontból fontos komplexképző ligandumok. Kalciumkomplexeik fontos szerepet játszanak pl. a Bayer-folyamatban, valamint a kis és közepes aktivitású radioaktív hulladéktárolók környezetében. Munkánk során négy kismolekulás hidroxi-/oxokarbonsav, az  $\alpha$ -D-izoszacharinát ( $\text{Isa}^-$ ), *D,L*-laktát ( $\text{Lac}^-$ ),  $\alpha$ -ketoglutarát ( $\alpha\text{-Ket}^{2-}$ ) és  $\beta$ -ketoglutarát ( $\beta\text{-Ket}^{2-}$ ) kalciumkomplekképző sajátosságait vizsgáltuk semleges és lúgos oldatokban (1. ábra). Vizsgáltuk továbbá a ligandumok lúgos közegben ( $\text{pH} > 12$ ) végbemenő deprotonálódását is. A deprotonálódás az  $\text{Isa}^-$  és  $\text{Lac}^-$  esetén egy OH-csoporton ment végbe, míg az  $\alpha\text{-Ket}^{2-}$  és  $\beta\text{-Ket}^{2-}$  esetén CH-deprotonálódás történik, melynek eredményeképp (enol-oxo tautóméria révén) enolátion képződik.



**1. ábra** Az  $\alpha$ -D-Isa<sup>-</sup> (a), *D,L*-Lac<sup>-</sup> (b),  $\alpha$ -Ket<sup>2-</sup> (c) és  $\beta$ -Ket<sup>2-</sup> (d) szerkezeti képlete.

Semleges közegben 1:1 (ML) és a Lac<sup>-</sup> esetében 1:2 (ML<sub>2</sub>) összetételű, kis stabilitású kalciumkomplexek képződését tapasztaltuk. Lúgos közegben 1:1:-1 (MLH<sub>-1</sub>) összetételű komplexek képződését mutattuk ki, emellett az  $\alpha$ -Ket<sup>2-</sup> és  $\beta$ -Ket<sup>2-</sup> esetén többmagvú kalciumkomplexek képződést is valószínűsítettük.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatásokat az NKFIH K 124 265, ÚNKP-17-2, NTP-EFÖ-P-15-0361-A és NTP-NFTÖ-16-0085 pályázatok támogatásával végeztük, amiért a Szerzők köszönetet mondanak.

## Metalloproteinek cisztein-gazdag Cu(I)- és Hg(II)-kötőhelyeit utánzó oligopeptidek

Mesterházy Edit<sup>a,b</sup>, Colette Lebrun<sup>a</sup>, Serge Crouzy<sup>c</sup>, Jancsó Attila<sup>b</sup>, Pascale Delangle<sup>a</sup>

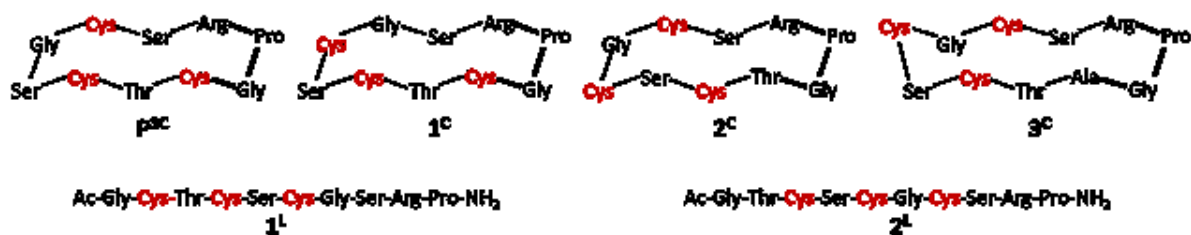
<sup>a</sup> CEA Grenoble/Université Grenoble Alpes/CNRS INAC, SyMMES, CIBEST

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

<sup>c</sup> CEA Grenoble/Université Grenoble Alpes/CNRS, BIG, LCBM

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

Az élő szervezetek számára esszenciális Cu(I), illetve toxikus Hg(II) ionok hasonló koordinációs kémiai sajátságokkal rendelkeznek, így nem meglepő, hogy a koncentrációjukat szabályzó (ill. detoxifikáló) rendszerek legfontosabb szereplői is hasonló, fémion-kötő centrumaikban cisztein aminosavakat tartalmazó fehérjék. Az előadásban olyan lineáris és ciklikus modellpeptidek fémion-kötő sajátságait tárgyaljuk, melyek szekvenciájába a metalloproteinekben előforduló CxCxxC vagy CxCxC motívumokat építettünk be. Az alábbi sémán szereplő peptidek Cu(I)- és Hg(II)-ionokkal történő kölcsönhatását UV-VIS- és CD-spektroszkópia, ESI-MS spektrometria, továbbá a kölcsönhatások erősségének meghatározása céljából különböző kompetíciós módszerekkel vizsgáltuk.



A ligandum–Cu(I) rendszerek részecske-speciációját semleges pH-tartományban többmagvú komplexek bonyolult egyensúlya jellemzi. Ezzel ellentétben a Hg(II)-ionok jól definiált összetételű és szerkezetű, az oldat pH-jától függően HgS<sub>2</sub> (pH = 2,0) és HgS<sub>3</sub> (pH = 7,4) koordinációs módú komplexeket alakítanak ki. A stabilitási adatok alapján a peptidek Hg(II)- ill. Cu(I)-kötő képessége között mintegy 20 nagyságrend különbség mutatkozik. A peptidek szignifikánsan eltérő viselkedése a két fémionnal szemben azt mutatja, hogy a Hg(II) nem minden esetben alkalmas próba-ion vizes közegben tiolátsoportok által koordinált Cu(I)-centrumok modellezésére.

Köszönetnyilvánítás: GINOP-2.3.2-15-2016-00038 és NKFIH K120130

## A $\text{Cu}^{2+}$ és $\text{Rh}(\text{Cp}^*)^{2+}$ ionok kölcsönhatása az $\text{NH}_2\text{-HHH-NH}_2$ tripeptiddel

Szorcsik Attila<sup>a</sup>, Nagy Nóra Veronika<sup>b</sup>, Matyuska Ferenc<sup>a</sup>, Gajda Tamás<sup>a</sup>

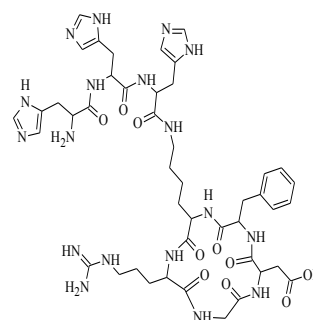
<sup>a</sup> Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

<sup>b</sup> MTA TTK, Kémiai Krisztallográfiai Kutatócsoport

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

Az integrin fehérjék heterodimer adhéziós receptorok, melyek számos biológiai szereppel bírnak. Az előadásom kapcsán fontos  $\alpha_v\beta_3$  integrin az angiogenezisben, a sejtosztódásban és migrációban játszik szerepet, ezért a rákos sejtek felszínén nagyon nagy számban van jelen. Ennek a receptornak több fehérje ligandja is ismert, melyek közös tulajdonsága az RGD szekvencia, ami a specifikus és meglepően erős megkötődést biztosítja. A megkötődés az integrin konformáció változását idézi elő, ami elindítja a sejten belüli antiangiogén jelkaskádót. Az RGD szekvenciát tartalmazó oligopeptidek közül a ciklo(RGDfK) eredményezi a legerősebb kötődést és a fenti konformációváltozást. Ezt a szekvenciát felhasználva tervezzük egy trifunkciós prototípus előállítását. E célból egy hisztidin tartalmú fémkötő-helyet tervezünk fenti ciklikus peptidhez kötni, ami reményeink szerint alkalmas lesz az  $\alpha_v\beta_3$  integrinen való erős megkötődésre, emellett a fémkötő alegység potenciálisan rákellenes hatóanyagok célzott rákos szövetekbe juttatását, valamint a rákos szövetekben meglepően magas libilis réz(II) koncentrációjának csökkentését tenné lehetővé. Ilyen módon háromszoros antiangiogén hatást szeretnénk elérni, ui. a réz elengedhetetlen kofaktora az angiogenezisnek.

Jelen előadásban e munkaterv első lépését a fémkötő alegység ( $\text{NH}_2\text{-HHH-NH}_2$ ) valamint N-terminális részletének (hisztidin-amid)  $\text{Cu}^{2+}$  és  $\text{Rh}(\text{Cp}^*)^{2+}$  ionokkal való kölcsönhatását mutatom be. Az eredményeink szerint az  $\text{Rh}(\text{Cp}^*)^{2+}$  ion igen nagy stabilitással kötődik fenti tripeptidhez, ugyanakkor a  $\text{Cu}^{2+}$  képes leszorítani azt a fémkötő szekvenciáról, így meg van az elvi lehetősége annak, hogy az említett konjugátum '3az1-ben' antiangiogén hatást fejtsen ki a rákos sejtek környezetében.



A tervezett konjugátum szerkezete

**Köszönetnyilvánítás:** Intelligens fémvegyületek GINOP-2.3.2-15-2016-00038

**Funkcionális aldehid deformiláz modellek előállítása**

*Kripli Balázs, Kaizer József, Speier Gábor,*

*Bashdar Ismael, Török Patrik*

Pannon Egyetem, Mérnöki kar, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

e-mail: patriktrk6@gmail.com

Annak ellenére, hogy kémiai szempontból a hosszú szénatomszámú alkánok a legkevésbé reaktív szerves molekulák közé tartoznak, az élővilágban több helyen is fellelhetők. A növények esetében például egyfajta impregnáló, ún. vax-sajátságú anyagként védik őket a kiszáradástól, a rovarok esetében pedig a szárnyakat az elázástól. A dekarboniláz enzimek a nemhém-típusú divastartalmú enzimek csoportjába tartoznak. Feladatuk a zsíraldehidek alkánokká történő deformilezése.

A fentiekhez kapcsolódóan az alkánok bioszintézisében is résztvevő, a cianobaktériumok által használt aldehid-deformilező-oxigenáz (cADO) enzim működését kívánjuk modellezni vizsgálataink során. A kísérleteinkhez nemhém-típusú *in situ* divas(III)-tartalmú *peroxo*-komplexekeket állítottunk elő és felhasználásukkal ún. bioutánzó reakciókat dolgoztunk ki. Modellvegyületként a fenil-acetaldehidet választottuk. Részletes reakciókinetikai mérések segítségével javaslatot tettünk a katalitikus rendszereink mechanizmusára.

**Köszönetnyilvánítás:** Az OTKA K108489 kutatási pályázat által nyújtott támogatásért.



## Pd(II)-ionok oldatbeli kölcsönhatásának vizsgálata peptidhidroxámsavakkal

*Ozsváth András, Diószegi Róbert, Farkas Etelka, Buglyó Péter*

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék:

e-mail: ozsvath.andras@science.unideb.hu

A mai rákterápiában elterjedten alkalmazzák a ciszplatint (*cisz*-[Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]), ami azonban a szelektivitás hiányából adódóan számos mellékhatással rendelkezik. A szelektivitás növelhető, ha kihasználjuk a normál és rákos sejtek közötti fiziológiás különbségeket, például a rákos szövetek oxigénhiányosabb állapotát. Ezért olyan hipoxia-aktivált [Co<sup>III</sup>(4N)L]<sup>n+</sup> komplexek fejleszthetők ki, ahol a Co(III)-hoz egy tripodális amin, és egy bidentát bioaktív ligandum kapcsolódik. Ezek a komplexek a daganatos sejtbe kerülve labilis Co(II)-komplexszé redukálódhatnak, így disszociálhat róluk a biológiailag aktív ligandum.

Egyes hidroxámsavak (R<sub>C</sub>C(O)N(R<sub>N</sub>)OH) bizonyítottan rákellenes hatással rendelkeznek, pl. a SAHA-t elterjedten alkalmazzák a fej-nyaki daganatok kezelésében. Ebből kifolyólag hidroxamát tartalmú [Co<sup>III</sup>(4N)] komplex előállításával esélyünk van szelektív készítményhez jutni. [1; 2] A szelektivitás tovább növelhető, ha a távozó molekularész képes egy második, várhatóan rákellenes hatású fémion megkötésére is. Ilyen molekulák lehetnek a peptidhidroxámsavak, melyek hidroxamát keláttal kapcsolódhatnak a Co(III)-hoz, míg a peptidváz koordinálhat egyéb fémionokat (pl.: Pt(II), Pd(II)).

Munkánk során primer és szekunder peptidhidroxámsavakat állítottunk elő (AlaAlaNHOH, AlaAlaN(Me)OH, AlaGlyGlyNHOH, AlaGlyGlyN(Me)OH) [3; 4], majd vizsgáltuk ezen ligandumok oldatbeli kölcsönhatását a Pt(II)-t modellező Pd(II)-ionokkal. Vizsgálatainkhoz pH-potenciometriás és <sup>1</sup>H NMR módszereket alkalmaztunk. Az előadásban a legújabb eredmények kerülnek bemutatásra.

[1] T. W. Failes, T. W. Hambley, *Dalton Trans.*, **2006**, 1895-1901

[2] P.D. Bonnitcha, B.J. Kim, R. Hocking, J.K. Clegg, P. Turner, S.M. Neville, T.W. Hambley, *Dalton Trans.*, **2012**, 11293

[3] P. Buglyó, E. M. Nagy, E. Farkas, I. Sóvágó, D. Sanna, G. Micera, *Polyhedron*, **2007** 26 1625-1633

[4] P. Buglyó, E. M. Nagy, I. Sóvágó, A. Ozsváth, D. Sanna, E. Farkas, *Polyhedron*, **2016**, 110 172-181

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás az OTKA (K112317) anyagi támogatása mellett, a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg.

**Biológiailag aktív fluorokinolon származékok Co(III) komplexeinek előállítása és vizsgálata**

*Kozsup Máté<sup>a</sup>, Farkas Etelka<sup>a</sup>, Bényei Attila<sup>b</sup>, Buglyó Péter<sup>a</sup>*

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

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

e-mail: kozsup.mate@science.unideb.hu

A kemoterápiában legelterjedtebben használt készítmények a különböző platina komplexek, melyek azonban a szelektivitás hiánya miatt számos káros mellékhatással rendelkeznek. A szelektivitás növelése érdekében előtérbe kerültek azok a vegyületek, melyek az egészséges és a rákos sejtek közötti különbségek következtében fejtik ki hatásukat. Az egyik legjelentősebb különbség a rákos sejtekben fennálló oxigénhiányos állapot (hipoxia), amelynek következtében a tumorban redukívabb környezet van jelen. Ezen okból lehetnek alkalmazhatóak az inert Co(III) komplexek, amelyek a rákos sejtben redukálódnak, így labilis Co(II) komplex keletkezik. Ez lehetővé teszi a rákellenes hatású ligandum felszabadulását a tumorban.

Kutatócsoportunkban olyan komplexek kifejlesztése, szintézise és vizsgálata folyik, melyekben a Co(III) 4 koordinációs helyét erősen koordinálódó N-donor atomokat tartalmazó tripodális aminok foglalják el, míg a fémion szabadon maradt két koordinációs helyére olyan, önmagukban is antitumor hatású, O,O donor bioligandumok kapcsolódhatnak, melyek a rákos sejtben szelektíven felszabadulva fejthetik ki hatásukat.

Munkánk során az antibakteriális és antitumor hatású fluorokinolon típusú bioligandumokat tartalmazó Co(III) komplexek szilárd fázisban történő előállításával, valamint redoxi sajátásaik vizsgálatával, illetve a komplexek szerkezetének röntgendiffrakciós vizsgálatával foglalkoztunk.

**Köszönetnyilvánítás:** A kutatás a GINOP-2.3.2.-15-2016-00008 és a GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projektek keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valamint az OTKA támogatásával (K112317) valósult meg.

# **Konferencia résztvevői**



név	intézmény	e-mail	előadás
Balogh Ria Katalin	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	baloghr@chem.u-szeged.hu	
Barczáné Buvári Ágnes	Eötvös Loránd Tudományegyetem	buvari@chem.elte.hu	
Bashdar Meena Ismael	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	bashdarismael@gmail.com	<u>E24</u> , E38
Botár Richárd	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	botar.richard@science.unideb.hu	E7, <u>E31</u>
Buglyó Péter	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	buglyo@science.unideb.hu	E4, <u>E27</u> , E32, E39, E40
Bunda Szilvia	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	bunda.szilvia@science.unideb.hu	<u>E16</u>
Császár Zsófia	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	csazsofi@gmail.com	<u>E14</u>
Csire Gizella	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	csire.gizella@science.unideb.hu	E17, <u>E18</u> , E23
Csupász Tibor	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	csupasz.tibor@gmail.com	<u>E6</u>
Dömötör Orsolya	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	domotor.o@chem.u-szeged.hu	E30
Dudás Csilla	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	dudas.csilla@chem.u-szeged.hu	E33, <u>E35</u>
Enyedy Éva Anna	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	enyedy@chem.u-szeged.hu	E3, <u>E30</u> ,
Farkas Etelka	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	efarkas@science.unideb.hu	E4, E32, E39, E40
Fábián István	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ifabian@science.unideb.hu	E2, E23
Fábián Zita	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	fabianzit@gmail.com	<u>E19</u>
Gajda Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tamas.gajda@chem.u-szeged.hu	E25, E33, <u>E37</u>
Garda Zoltán	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	garda.zoltan@science.unideb.hu	E6, <u>E7</u>
Gál Gyula Tamás	MTA Természettudományi Kutatóközpont	gal.tamas@ttk.mta.hu	E30

## 52. Komplexkémiai Kollokvium

<b>név</b>	<b>intézmény</b>	<b>e-mail</b>	<b>előadás</b>
Gyurcsik Béla	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	gyurcsik@chem.u-szeged.hu	E10, E19, E20
Hajdu Bálint	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	balinth11@gmail.com	<u>E10</u>
Hermann Enikő	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	eniko.hermann@gmail.com	<u>E20</u>
Horváth Dávid	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	horvath.david@science.unideb.hu	<u>E11</u>
Horváth Henrietta	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	henrietta.horvath@science.unideb.hu	E12, E13, E15
Jakusch Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jakusch@chem.u-szeged.hu	
Jancsó Attila	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jancso@chem.u-szeged.hu	E34, <u>E36</u>
Juhász Ádám	Szegedi Tudományegyetem, ÁOK Orvosi Vegytani Intézet	juhaszadam79@gmail.com	E29
Juhászné Csapó Edit	Szegedi Tudományegyetem, ÁOK Orvosi Vegytani Intézet	juhaszne.csapo.edit@med.u-szeged.hu	<u>E29</u>
Kaizer József	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	kaizer@almos.vein.hu	E9, E24, E38
Kállay Csilla	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kallay.csilla@science.unideb.hu	<u>E17</u> , E18
Keszei Soma József	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	KoRnflakes09@gmail.com	<u>E5</u>
Kiss Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tkiss@chem.u-szeged.hu	<u>E26</u>
Kovács Henrietta	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	kovacshenrietta92@gmail.com	<u>E12</u>
Kozsup Máté	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kozsup.mate@science.unideb.hu	<u>E40</u>
Kripli Balázs	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	balazskripli@gmail.com	<u>E9</u> , E24, E38
Kutus Bence	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kutusb@chem.u-szeged.hu	E22, E35
Lih Norbert	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	lihi.norbert@science.unideb.hu	<u>E23</u>

név	intézmény	e-mail	előadás
Lukács Márton	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	lukacs.marton@science.unideb.hu	
Matyuska Ferenc	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	matfer@chem.u-szeged.hu	<u>E25</u> , E37
May Nóra Veronika	MTA Természettudományi Kutatóközpont	may.nora@ttk.mta.hu	E3, E30
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>E34</u> , E36
Mészáros János Péter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	meszaros.janos@chem.u-szeged.hu	<u>E3</u> , E30
Nagy Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	nagyimre@science.unideb.hu	<u>E32</u>
Nagy Sándor	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	nagy.sandor@science.unideb.hu	<u>E4</u>
Nyulászi László	BME Szervetlen és Analitikai Kémia	nyulaszi@mail.bme.hu	<u>E21</u>
Orosz Krisztina Andrea	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	krisztina.orosz22@gmail.com	<u>E15</u>
Ozsváth András	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ozsvath.andras@science.unideb.hu	<u>E39</u>
Ölveti Gábor	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	olvetigabor@gmail.com	<u>E13</u>
Papp Gábor	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	papp.gabor@science.unideb.hu	E12, E13, E15
Pálincás Dóra Csilla	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	palinkasdora33@gmail.com	
Peintler Gábor	Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék	peintler@chem.u-szeged.hu	<u>E22</u> , E35
Speier Gábor	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	speier@almos.vein.hu	E9, E24, E38
Szabó Mária	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szabo.maria@science.unideb.hu	
Szakács Bence	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szakacs.bence28@gmail.com	E23

## 52. Komplexkémiai Kollokvium

név	intézmény	e-mail	előadás
Szekeres Levente István	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	slevente@chem.u-szeged.hu	
Szigyártó Imola Csilla	MTA Természettudományi Kutatóközpont	szigyarto.imola.csilla@ttk.mta.hu	
Szorcsik Attila	MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport	szorcsik@chem.u-szeged.hu	<u>E33</u> , E37
Szunyog Györgyi	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szunyog.gyorgyi@science.unideb.hu	
Terényi Ferenc	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	terenyiferi@hotmail.com	
Tircsó Gyula	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	gyula.tircso@science.unideb.hu	E1, E6, E7, <u>E8</u> , E31
Tóth Csilla Noémi	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	toth.csilla.noemi@science.unideb.hu	<u>E2</u> ,
Tóth Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	imre.toth@science.unideb.hu	E6-E8, E11
Tóth-Molnár Enikő	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	molnar.eniko@science.unideb.hu	<u>E1</u> , E7, E31
Török Patrik	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	patriktrk6@gmail.com	<u>E38</u>
Várad Balázs	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varadiiiii@gmail.com	E6, E8
Várnagy Katalin	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varnagy.katalin@science.unideb.hu	E23, <u>E28</u>