

53. Komplexkémiái Kollokvium

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

2019. május 21-23., Velence

Részletes program

Elnök: Várnagy Katalin (DE)

14.00 – 14.10 Megnyitó

14.10 – 14.30 Kálmán Ferenc Krisztián, Botár Richárd, Tarnóczy Katinka, Tóth-Molnár Enikő, Nagy Viktória, Garda Zoltán, Várad Balázs, Trencsényi György, Jakab-Tóth Éva, Tircsó Gyula (DE): **Mn(II)-alapú, pH-szenzitív MRI kontrasztanyag jelöltek vizsgálata**

E1

14.30 – 14.50 Molnár Enikő, Kálmán Ferenc Krisztián, Mariane Le Fur, Maryline Beyler, Olivier Fougère, David Esteban-Gómez, Carlos Platas-Iglesias, Nicolas Lepareur, Olivier Rousseaux, Raphaël Tripier, Tircsó Gyula (DE): **Makrociklusos pikolinátsoportot tartalmazó ligandumok Gd³⁺-komplexeinek koordinációs kémiai vizsgálata: egyensúly és kinetika**

E2

14.50 – 15.10 Várad Balázs, Madarasi Enikő, Nagy Anna Erika, Nyilas Zsuzsanna, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **Makrociklusos Mn²⁺-komplexek paramétereinek finomhangolása: az oldalláncok elhelyezkedésének szerepe a szerkezeti izomerek viselkedésében**

E3

15.10 – 15.30 Jakusch Tamás, Kiss Tamás (SzTE): **Cu(II) specifikus ligandumok. Kelátterápia az Alzheimer kór kezelésében?**

E4

15.30 – 15.50 Hajdu Bálint, Kohsuke Kato, Nagata Kyosuke, Gyurcsik Béla (SzTE): **Fém tartalmú fehérje alapú nukleázok DNS specifikációja**

E5

15.50 – 16.20 *Szünet*

Elnök: Tircsó Gyula (DE)

16.20 – 16.40 Dömötör Orsolya, Tatsiana Petrasheuskaya, Gál G. Tamás, May Nóra Veronika, Nové Márta, Kincses Annamária, Spengler Gabriella, Ana Čipak Gašparović, Kiss Márton A., Frank Éva, Enyedy Éva Anna (SzTE): **Pirazolo- és szaliciladehid-tioszemikarbazon ligandumok Cu(II) és Ru(II)(p-cimol) komplexei: szintézis, rákellenes aktivitás, stabilitás és szerkezet**

E6

16.40 – 17.00 Szakács Bence, Várnagy Katalin (DE): **Metalloprotein kötőhelyét modellező tripeptidek átmenetifém-komplexei**

E7

17.00 – 17.20 Balogh Bettina Diána, Csire Gizella, Kerekes Zsuzsanna, Lukács Márton, Várnagy Katalin (DE): **Az N- és C-terminális rész fémionkötő képességének összehasonlítása a HAVAHHH-NH₂ peptidben**

E8

17.20 – 17.40 Gál Gyula Tamás, May Nóra, Bombicz Petra (MTA TTK): **Klopamid gyógyszerhatóanyag és réz(II)-komplexeinek szerkezetvizsgálata különböző kristályosítási körülmények között**

E9

17.40 – 18.00 Ozsváth András, Diószegi Róbert, Bényei Attila, Buglyó Péter (DE): **Peptid-hidroxipiridinon konjugátumok szintézise és Pd(II)-komplexeinek vizsgálata**

E10

05.21. kedd

05.21. kedd

05.21. kedd

05.21. kedd

05.21. kedd

05.21. kedd

05.21. kedd

05.22. szerda

Elnök: Csapó Edit (SzTE)

9.00 – 9.20 **E11** Lukács Márton, Szunyog Györgyi, Grenács Ágnes, Kállay Csilla, Giuseppe Di Natale, Giuseppe Pappalardo, Várnagy Katalin, Sóvágó Imre, Csire Gizella (DE): **A tau fehérje két kötőhelyét modellező peptidek Cu(II) és Ni(II) komplexeinek oldategyensúlyi vizsgálata**

9.20 – 9.40 **E12** Lihi Norbert, Csire Gizella, May Nóra Veronika, Várnagy Katalin, Sóvágó Imre, Fábíán István (DE): **NiSOD enzimmodellek fémionszabályzó sajátságai**

9.40 – 10.00 **E13** Szunyog Györgyi, Várnagy Katalin (DE): **Cisztein-tartalmú peptidek Ni(II)-komplexei**

10.00 – 10.20 **E14** Kripli Balázs, Sólyom Bernadett, Kaizer József, Speier Gábor (PE): **Királis, ötfogú N-donor ligandumokat tartalmazó vas-, mangán-, és réz-tartalmú enzimmodellek vizsgálata vizes rendszerekben**

10.20 – 10.40 **E15** Major Máté Miklós, Rövid Gergő, Lendvay György, Balogh Szabolcs, Bényei Attila, Bakos József, Farkas Gergely (PE): **Királis, kéntartalmú heterodonor ligandumok szintézise, koordinációs és katalitikus tulajdonságai**

10.40 – 11.10 *Szünet*

05.22. szerda

05.22. szerda

Elnök: Nyulászi László (BME)

11.10 – 11.30 **E16** Czégéni Csilla Enikő, De Sourav, Orosz Krisztina, Horváth Henrietta, Joó Ferenc (DE): **Kelát és kétmagvú átmenetifém-di-N-heterociklusos karbén komplexek**

11.30 – 11.50 **E17** Kozsup Máté, Darren Griffith, Donal M. Keogan, Brendan Twamley, Farkas Etelka, Buglyó Péter (DE): **Antibakteriális hatású biomolekulák fémkomplexeinek előállítása és vizsgálata**

11.50 – 12.10 **E18** Simon Fruzsina, Bíró Vivien, Szabó Mária, Fábíán István (DE): **Elágazó láncú aminosavakból képződő klóraminok bomlása**

12.10 – 12.30 **E19** Bashdar Ismael, Kripli Balázs, Kaizer József, Speier Gábor (PE): **Catalytic Oxidation of N,N-dimethylaniline via Mn(IV)-Oxo intermediate**

12.30 – 12.50 **E20** Jorge Lado, Jesus J. Fernandez, Alberto A. Fernandez, Digna Vazquez-Garcia, Margarita Lopez-Torres, Pálkó István, Sipos Pál (SzTE): **Multifunctionalized p-cymene ruthenium (II) compounds as promising new antineoplastic agents**

12.50 – 14.30 *Szünet*

05.22. szerda

05.22. szerda

05.22. szerda

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

14.30 – 14.40 Elnöki megnyitó

14.40 – 15.00 Papp Gábor, ...sokan mások..., Joó Ferenc (DE): **Homogén katalízis kutatások „debreceni vizekben” – 22 év**
E2115.00 – 15.20 Horváth Henrietta, Papp Gábor, Kovács Henrietta, Orosz Krisztina, Kathó Ágnes, Joó Ferenc (DE): **Vízoldható Ir(I)-NHC-foszfin komplexek előállítása és alkalmazásuk homogén katalitikus hidrogénezésben és hidrogéntárolásban**
E2215.20 – 15.40 Takács Attila, Szuroczki Péter, Kollár László (PTE): **N-Heterociklusos vegyületek szintézise átmenetifém-katalizált reakciókban**
E2315.40 – 16.10 *Szünet*16.10 – 16.30 Pápai Imre (MTA TTK): **Homogén katalitikus hidrogénezés átmeneti fémekkel és anélkül**
E2416.30 – 16.50 Gyurcsik Béla, Hajdu Bálint, Abd Elhameed Heba A., Bal Wojciech, Nagata Kyosuke (SzTE): **Fémionok által szabályozott mesterséges nukelázok**
E2516.50 – 17.10 Papp Máté, Urbán Béla, Adamcsik Bernadett, Füttyű Júlia, Skodáné Földes Rita (PE): **Rögzített ionfolyadék hordozók alkalmazása újrahasználató palládium katalizátorok kialakítására**
E26

17.10 – 17.20 Elnöki zárszó

05.22. szerda

05.22. szerda

05.22. szerda

05.22. szerda

05.22. szerda

05.22. szerda

05.22. szerda

Elnök: Kripli Balázs (PE)

9.00 – 9.20 Orbán Eszter, Szabados Márton, Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **Szilikáttartalmú vegyületek oldódási kinetikájának vizsgálata ipari körülmények között**
E27

9.20 – 9.40 Ziegenheim Szilveszter, Slam Szintia, Sipos Pál, Pálinkó István (SzTE): **Na-citrát hatása gipsz kristályosodására erősen túltelített oldatból**
E28

9.40 – 10.00 Garda Zoltán, Kálmán Ferenc Krisztián, Madarasi Enikő, Váradi Balázs, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **A [Mn(CD₂A₂AM^{Pip})]-komplex szerkezeti izomerjeinek elválasztása és koordinációs kémiai jellemzése**
E29

10.00 – 10.20 Nagy Sándor, Makai Attila, Farkas Etelka, Bényei Attila, Buglyó Péter (DE): **Várhatóan hipoxia-aktivált kétfémes komplexek előállítása és vizsgálata**
E30

10.20 – 10.40 Nagy Imre, Vas Péter Mihály, Farkas Etelka, Buglyó Péter (DE): **Fluorofórt tartalmazó deferasirox-származékok és komplexeik előállítása, valamint vizsgálata**
E31

10.40 – 11.10 *Szünet*

Elnök: Sipos Pál (SzTE)

11.10 – 11.30 Purgel Mihály, Balogh Alex Kálmán, Fehér Péter Pál, Joó Ferenc (DE): **Szalán típusú komplexek szerkezeti analízise kvantumkémiai módszerekkel**
E32

11.30 – 11.50 Fekete Csaba, Kovács Ilona, Holczbauer Tamás, Nyulászi László (BME): **Szilolid anionok és dianionok komplexképzési változatai**
E33

11.50 – 12.10 Kaizer József, Török Patrik, Kripli Balázs, Speier Gábor (PE): **Funkcionális aldehid deformiláz enzim modellek előállítása**
E34

12.10 – 12.30 Szorcsik Attila, Azza Ahmed Hassoon, Fülöp Livia, Papp Zita Ibolya, Gajda Tamás (SzTE): **RhCp* kation kölcsönhatása peptidekkel**
E35

Előadás-összefoglalók

Mn(II)-alapú, pH-szenzitív MRI kontrasztanyag jelöltek vizsgálata

Kálmán Ferenc K.^a, Botár Richárd^a, Tarnóczy Katinka^a, Tóth-Molnár Enikő^a, Nagy Viktória^a,

Garda Zoltán^a, Váradi Balázs^a, Trencsényi György^b, Jakab-Tóth Éva^c, Tircsó Gyula^a

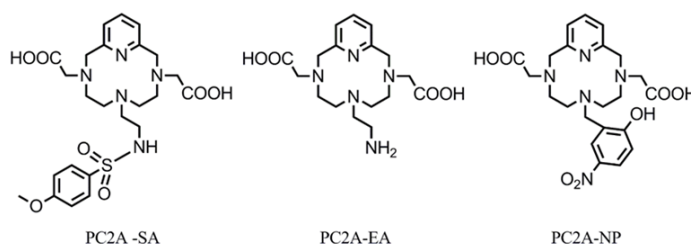
^a Debreceni Egyetem, TTK, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Debreceni Egyetem, ÁOK, Orvosi Képző Intézet, Nukleáris Medicina Nem Önálló Tanszék, 4032 Debrecen, Nagyerdei körút 98.

^c Centre de Biophysique Moléculaire, Rue Charles Sadron, CS 80054, 45071, ORLEANS CEDEX 2, CNRS, France

e-mail: kalman.ferenc@science.unideb.hu

Ahhoz kétség sem fér, hogy a Mágneses Rezonanciás Képző (MRI) jelentősége az orvosi diagnosztika területén kiemelkedő, elsősorban az anatómiai elváltozások diagnosztikájában. Az MRI képek kontrasztanyagok alkalmazása nélkül is megfelelő minőségűek lehetnek, ugyanakkor a paramágneses fémkomplexek jelentősen növelik azok kontrasztosságát és csökkentik a vizsgálathoz szükséges időt. Manapság egyre nagyobb igény mutatkozik a molekuláris szintű diagnosztikára, amelyben biológiai folyamatokat követhetünk, vagy egyes szövetek fizikai-kémiai paramétereit határozhatjuk meg. Ezek a vizsgálatok ugyanakkor csak speciális, úgynevezett „smart” kontrasztanyagokkal valósíthatók meg.^[1] Ebben az előadásban a PC2A-SA, PC2A-EA és PC2A-NP ligandumok (1. ábra) koordinációs kémiai vizsgálatát mutatjuk be, amelyek Mn(II)-alapú pH-szenzitív kontrasztanyag jelöltek.



1. ábra: A vizsgált ligandumok szerkezeti képlete

[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 szerzők köszönetüket fejezik ki az anyagi támogatásért az NKFIH K-120224 (T. Gy.) pályázatnak és a Magyar Tudományos Akadémia Bolyai János Kutatói Ösztöndíjának (K. F. K. és T. Gy.). A kutatás a GINOP-2.3.2.-15-2016-00008 és GINOP-2.3.3-15-2016-00004 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A kutatás az emberi erőforrások minisztériuma ÚNKP-18-4 kódszámú új nemzeti kiválósági programjának támogatásával készült. (K. F. K. és T. Gy.).

**Makrociklusos pikolinátcsoportot tartalmazó ligandumok Gd³⁺-
komplexeinek koordinációs kémiai vizsgálata: egyensúly és kinetika**

*Molnár Enikő^a, Kálmán Ferenc K.^a, Mariane Le Fur^b, Maryline Beyler^b, Olivier Fougère^c,
David Esteban-Gómez^d, Carlos Platas-Iglesias^d, Nicolas Lepareur^e, Olivier Rousseaux^c,
Raphaël Tripier^b, Tircsó Gyula^a*

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

^b Université de Bretagne Occidentale, IBSAM, UFR des Sciences et Techniques

^c Groupe Guerbet, Centre de Recherche d'Aulnay-sous-Bois

^d Departamento de Química, Facultad de Ciencias & Centro de Investigaciones Científicas Avanzadas (CICA), Universidade da Coruña

^e Département de Médecine Nucléaire, Centre Eugène Marquis

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

A Mágneses Rezonanciás Képzőanyag (MRI) során alkalmazott kontrasztanyagokkal kapcsolatban az utóbbi években számos probléma felmerült, ezért fellendültek azok a kutatások, amelyek az eddigieknél biztonságosabb kontrasztanyag jelöltek előállítását célozták. Irodalmi előzmények azt mutatták, hogy a piklén platform alkalmas lehet nagy inertiséggel rendelkező ritkaföldfém(III)-komplexek tervezéséhez, ezért négy komplexképző, a PC2A1PA^{sym}, a PC2A1PA^{asym}, a PC1A2PA^{sym} és a PC1A2PA^{asym} Gd³⁺-komplexeinek fizikokémiai vizsgálatát tűztük ki célul. Az eredményeink alapján megállapítható, hogy a ligandum oldalláncainak egymáshoz viszonyított helyzete jelentősen befolyásolja a képződő komplexek fizikokémiai paramétereit (stabilitás, oldószercsere, képződési és disszociációs kinetika), ill. szerkezetét. Az izomer ligandumok (sym- vs. asym-) komplexei viselkedésének a magyarázata az axiláris kötőhely lazító hatásra vezethető vissza. Ezen hatás eredményeként a nem szimmetrikus ligandumok komplexei az MRI alkalmazások szempontjából érdekes paraméterek tekintetében minden esetben kedvezőbb paraméterekkel rendelkeztek, mint azt a szimmetrikus származékoknál tapasztaltuk.

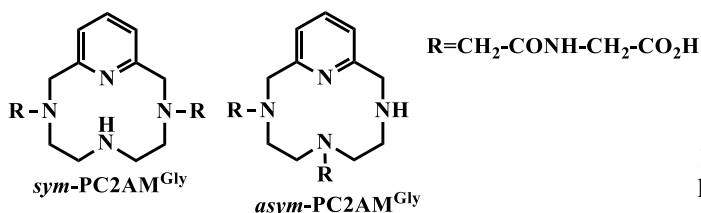
Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A vizsgálatunkat a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-120224 sz. pályázata, a Magyar Tudományos Akadémia (Bolyai János Kutatói Ösztöndíj), ill. az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjainak a támogatásával készült.

Makrociklusos Mn²⁺-komplexek paramétereinek finomhangolása: az oldalláncok elhelyezkedésének szerepe a szerkezeti izomerek viselkedésében

Váradi Balázs, Madarasi Enikő, Nagy Anna Erika, Nyilas Zsuzsanna, Tóth Imre, Tirscó Gyula
 Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

e-mail: varadiiiii@gmail.com

A Gd³⁺-alapú Mágneses Rezonanciás Képpalkotás (MRI) kontrasztanyagok alkalmazásával kapcsolatos problémák (Nefrogén Szisztémás Fibrózis megbetegedések (NSF), szöveti Gd³⁺-felhalmozódás, pozitív Gd³⁺-anomália) megélnkítette a Mn²⁺-komplexek kutatását. Az ilyen komplexek előállítása és fizikai kémiai paramétereinek (termodinamikai, kinetikai, relaxációs tulajdonságok) a finomhangolása a komplexképzők szerkezetében végrehajtott céltudatos változtatásokkal érhető el. Az MRI szempontjából a legfontosabb paraméterek módosítására több „eszközt” is kipróbáltak már (pl. a megfelelő „alapváz”, a donortomok, az oldalláncok optimalása). A Gd³⁺-komplexekre a közelmúltban kimutattuk, hogy a kelátok fizikokémiai paramétereik függnek az oldalláncok makrocikluson való elhelyezkedésének sorrendjétől/egymáshoz viszonyított helyzetétől.^[1] A Mn²⁺-komplexek vizsgálatához ezen hatás tanulmányozásához előállítottunk két piklén-bisz(amid) származékot (*sym*-PC2AM^{Gly} és *asym*-PC2AM^{Gly}, 1. ábra). Meghatároztuk a komplexképzők protonálódási állandóit, ill. néhány esszenciális kétvegyértékű fémionnal (Mg²⁺, Ca²⁺, Mn²⁺, Cu²⁺ és Zn²⁺) képződő komplexeik stabilitását, tanulmányoztuk a Mn²⁺-komplexek disszociációs kinetikáját és meghatároztuk a Mn²⁺-kelátok relaxivitását. Megállapítottuk, hogy a kétszeresen helyettesített piklén származékok komplexeinek fizikokémiai paramétereik jelentősen függenek az oldalláncok elhelyezkedésétől/helyzetétől a makrocikluson.



1. ábra: A *sym*-PC2AM^{Gly} és *asym*-PC2AM^{Gly} komplexképzők szerkezete

[1] Le Fur, M., Molnár, E., Beyler, M., Kálmán, F. K., Fougère, O., Esteban-Gómez, D., Rousseaux, O., Tripier, R., Tirscó, G., Plasas-Iglesias, C., *Chem. Eur. J.* 2018, 24(13), 3127-3131.

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), ill. az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjainak a támogatásával készült.

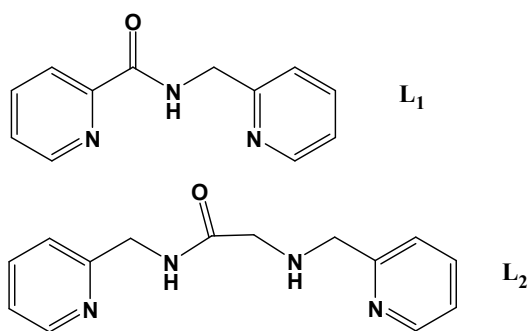
Cu(II) specifikus ligandumok Kelátterápia az Alzheimer kór kezelésében?

Jakusch Tamás, Kiss Tamás

Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

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

Az Alzheimer-kóros agyban a réz a β -amiloidból álló úgynevezett szenilis plakkok halmozódik fel, miközben a sejtekben rézhiány alakul ki. Egy mesterséges rézszállító molekulával vissza lehetne vinni a hiányzó fémiont a plakkokból a sejtekbe, eljuttatni a β -



amiloidtól ($A\beta$) a sejt felszíni hCTR1 transzport fehérjéig. Egy ilyen mesterséges szállító molekulának kisméretűnek kell lennie (átjuthasson a vér-agy gáton) nagyobb réz(II)ion kötő képességgel kell rendelkeznie mint a β -amiloid ($pM \sim 10$),^[2] de kisebbnek, mint a hCTR1.^[3] Az

Irving-Williams sor alapján a Cu(II)ionok mindig nagyobb stabilitású komplexeket fognak képezni, mint a Zn(II). Mindazonáltal a szabad Zn(II) koncentrációja a szabad Cu(II) koncentrációjához képest jelentősen nagyobb biológiai rendszerekben, tehát ha el akarjuk kerülni a Zn(II)-vel történő kompetíciót, Cu(II) specifikus ligandumra lehet szükségünk. Az ábrán látható két ligandumot szintetizáltuk és megvizsgáltuk a Cu(II) és Zn(II) komplexeiket pH-metriás UV-Vis és ESR módszerekkel. Meglepetésünkre a vizsgálati körülmények között (koncentráció a millimol nagyságrendjében) a Zn(II)ionok is képesek voltak indukálni részben, vagy teljesen az amidnitrogén deprotonálódás már fiziológiás pH tartományban is. A terápiához hasonló körülmények ($pH 7,4$; $c(L) \sim 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$) között azonban a Zn(II) komplex képződésének mértéke elhanyagolható. Mindkét ligandum képes a Cu(II)ionokat eltávolítani az $A\beta_{1-16}$ komplexéből, illetve megakadályozni a ROS képződését az $A\beta_{1-16}$ /aszkorbinsav/Cu(II) rendszerben még magas Zn(II) koncentráció mellett is.

[1] K. P. Kepp, *Chem. Rev.*, **2012**, *112*, 5193-5239.

[2] P. Faller, *Dalton Trans.*, **2009**, *7*, 1080-1094.

[3] N. K. Wee, D. C. Weinstein, S. T. Fraser, S. J. Assinder, *Int. J. Biochem. Cell Biol.*, **2013**, *45*, 960-963.

Köszönetnyilvánítás: Ez a munka nem jött volna létre a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) anyagi támogatása nélkül. (GINOP-2.3.2-15-2016-00038)

Fém tartalmú fehérje alapú nukleázok DNS specifikitása

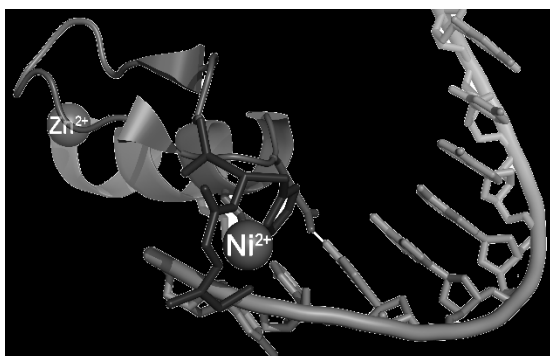
Hajdu Bálint^a, Kohsuke Kato^b, Nagata Kyosuke^b, Gyurcsik Béla^{a}*

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Nagata Special Laboratory, Faculty of Medicine, University of Tsukuba, Japan

e-mail: balinth11@chem.u-szeged.hu

A cinkujjak moduláris felépítésű specifikus DNS kötő fehérjék, melyek oly módon tervezhetők, hogy szinte bármilyen kívánt DNS-bázis szakaszt felismerjenek.^[1] Korábbi munkánk során megvalósítottuk egy cinkujj fehérje szelektív hidrolízisét Ni²⁺-ionokkal, melynek hatására annak N-terminális végén egy ATCUN motívum alakult ki.^[2] Ezen motívum Cu(II) és Ni(II) komplexe korábbi ismereteink alapján képes a DNS nonspecifikus hasítására.^[3] Jelen munkánkban arra kerestük a választ, hogy az így előállított fehérje funkcionálhat-e mesterséges metallonukleázként, melyben a cinkujj egység felismeri a DNS-t az N-terminális ATCUN motívum pedig elhasítja azt a kötőhely közelében.




Tanulmányoztuk a reakciótermék kölcsönhatását DNS-sel, valamint kompetíciós vizsgálatokba is belekezdünk hiszen fehérjék jelenlétében. Az eredmények tükrében módosított fehérjéket terveztünk. Az ATCUN és a cinkujj részletek közötti linker hosszának, illetve aminosav összetételének változtatása befolyásolhatja a Ni²⁺-komplex kialakulását és reakcióképességét is. Reményeink szerint ez a nukleáz specifikitásának és aktivitásának növeléséhez vezet.

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

[2] A. Belczyk-Ciesielska, B. Csipak, B. Hajdu, A. Sparavier, M. N. Asaka, K. Nagata, B. Gyurcsik W. Bal, *Metallomics.*, **2018**, 1089–1098

[3] Eric C. Long, *Acc. Chem. Res.*, **1999**, 32 (10), 827–836

Köszönetnyilvánítás: „ AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA UNKP-18-3 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT”

Pirazolo- és szalicilaldehid-tioszemikarbazon ligandumok

Cu(II) és Ru(II)(*p*-cimol) komplexei:

szintézis, rákellenes aktivitás, stabilitás és szerkezet

Dömötör Orsolya^a, *Tatsiana Petrasheuskaya*^a, *Gál G. Tamás*^b, *May Nóra Veronika*^b,

Nové Márta^c, *Kincses Annamária*^c, *Spengler Gabriella*^c, *Ana Čipak Gašparović*^d,

Kiss Márton A.^e, *Frank Éva*^e, *Enyedy Éva Anna*^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b MTA-TTK, Műszercentrum, Kémiai Krisztallográfia Kutatólaboratórium

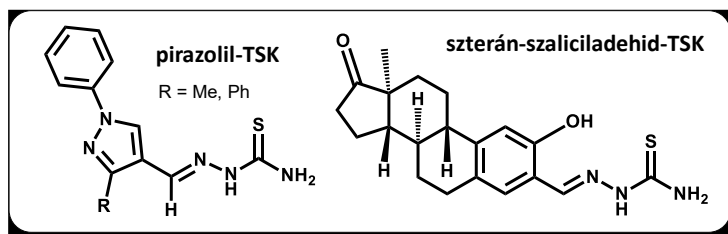
^c Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Mikrobiológiai és Immunbiológiai Intézet

^d Rudjer Boskovic Institute, HR 10000 Zagreb, Croatia

^e Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

e-mail: domotor.o@chem.u-szeged.hu

A rákellenes aktivitású tioszemikarbazonok (TSK) közül eddig három vegyület a Triapine, a COTI-2 és a DpC került klinikai kipróbálásra. Feltételezett hatásmechanizmusuk szerint a vas(II)/(III)- ionokkal komplexet képezve reaktív oxigén gyökök (ROS) termelését indukálják. ROS képzést Cu(II)-TSK komplexek esetében is leírtak; ismert továbbá más fémionok TSK komplexeinek rákellenes aktivitása is az irodalomban. A rákellenes hatás növelésének érdekében lehetséges stratégia a TSK molekularész szteroid hormon származékokkal való kombinálása; vagy TSK-Ru(II)(arén) komplexek képzésével a fémorganikus rész is hozzájárulhat a citotoxikus aktivitáshoz.



Jelen munka keretében egy újonnan előállított szteroid-vázis szalicilaldehid-TSK és két pirazolil-TSK különböző rákos sejtvonalakon mutatott aktivitását vizsgáltuk Cu(II)- és Ru(II)(η^6 -*p*-cimol)-ionok jelen- és távollétében. Bemutatom a képződő komplexek vizes oldatbeli viselkedését, szilárd fázisú szerkezetét és a Cu(II)-komplexek hatását a sejtek redoxi egyensúlyára.

Köszönetnyilvánítás: GINOP-2.3.2-15-2016-00038, NKFIA FK 124240, ÚNKP-18-2 (K.M.A.), ÚNKP-4-Bolyai+ (E.É.A.)

Metalloprotein kötőhelyét modellező tripeptidek átmenetifém-komplexei

Szakács Bence^a, Várnagy Katalin^a

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

email: szakacs.bence28@gmail.com

A létfontosságú fémionok igen fontos szerepet töltenek be különböző metalloproteinek, metalloenzimek alkotórészeként. Jól ismert például, hogy a szuperoxid-gyök elbontásáért felelős Cu,Zn-SOD enzim aktív centrumában a réz(II)ion a hisztidinek oldalláncbeli imidazolgyűrűihez koordinálódik.^[1] Ismertek azonban nikkeltartalmú enzimek is, például a Ni-SOD enzim, melyekben a nikkelt(II)ion hisztidint és ciszteint tartalmazó peptidrészekhez kötődik.^[2]

A cink(II)ion a Cu,Zn-SOD enzimben szerkezetstabilizáló szerepet tölt be, ugyanakkor a szervezetben számos sav-bázis folyamatot katalizál különböző metalloenzimek részeként. A kadmium(II)ion toxikus fémion, kémiai tulajdonságai rendkívül hasonlóak a cink(II)ionéhoz, ezért a megfelelő enzimekben képes a cink(II)iont helyettesítve súlyos elváltozásokat okozni a szervezetben. A kadmium(II)ion szelektív megkötésére az egy vagy több tiolcsoportot tartalmazó peptidok biztosíthatnak lehetőséget, illetve fontos szerepe lehet a láncvégi aminocsoportoknak és a hisztidin imidazolnitrogéneknek is. A többféle oldalláncbeli donorcsoportot tartalmazó peptidok fémion kötőhelyeinek azonosításában azonban gyakran szükség van a kistagszámú peptidok koordinációs kémiai jellemzésére is.

Két cisztein és hisztidin tartalmú tripeptid (a HCA-NH₂ és CHA-NH₂) sav-bázis tulajdonságait, illetve ezen peptidok Ni(II)-, Zn(II)- és Cd(II)-komplexeinek oldategyensúlyi vizsgálatát végeztem el pH-potenciometria alkalmazásával. ***Ezt követően UV-Vis és cirkuláris dikroizmus spektroszkópia segítségével meghatároztuk a peptidok koordinációs kémiai jellemzőit mindhárom fémion esetében az aminosav-szekvencia függvényében.***

[1] Y. Sheng, I. A. Abreu, D. E. Cabelli, M. J. Maroney, A.-F. Miller, M. Teixeira, J. S. Valentine, *Chemical Reviews*, **2014**, *114*, 3854–3918.

[2] H. D. Youn, E. J. Kim, J. H. Roe, Y. C. Hah, S. O. Kang, *Biochemical Journal*, **1996**, *318*, 889–896.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a Debreceni Egyetem Tehetséggondozó Programjának (DETEP), a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával, valamint



az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

**Az N- és C-terminális rész fémionkötő képességének összehasonlítása a
HAVAHHH-NH₂ peptidben**

*Balogh Bettina Diána^a, Csire Gizella^{a,b}, Kerekes Zsuzsanna^a, Lukács Márton^a,
Várnagy Katalin^a*

^a Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Groupe MolSyBio, L2CM UMR 7053 Université de Lorraine - CNRS Faculté des Sciences
et Technologies Bvd des Aiguillettes, BP 70239 54506 Vandoeuvre-lès-Nancy cedex
e-mail: balogh.bettina@science.unideb.hu

Bizonyos fémionok létfontosságúak az élő szervezet megfelelő működéséhez. Szerepet játszatnak többek között szerves molekulák szintézisében és transzportjában, valamint savbázis és redoxifolyamatok katalízisében. A metalloenzimekben a fémionok a polipeptidlánc speciális aminosavjaihoz kötődnek. Ilyen specifikus kötőhely a hisztidin aminosav imidazolil-oldallánca. Az ilyen fémion-fehérje kölcsönhatás szerepet játszik például a Cu-Zn SOD enzim működésében vagy a neurodegeneratív betegségek kialakulásában. Éppen ezért lényeges az átmeneti fémionok és peptidek, fehérjék között kialakuló kölcsönhatások átfogó, alapos tanulmányozása.

Az N-terminálisan szabad, multihisztidin peptid, a HAVAHHH-NH₂ Cu(II)-, Ni(II)- és Zn(II)-ionokkal képzett komplexeit, valamint vegyes fémkomplexeit pH-potenciometria, UV-látható spektrofotometria, cirkuláris dikroizmus spektroszkópia, ESI-MS és tandem tömegspektrometria segítségével vizsgáltuk.

Fiziológiás pH-tartományban mindhárom fémion a molekula N-terminális részéhez koordinálódik, de a távolabbi hisztidil-láncok is részt vehetnek a fémion megkötésében. Nagyobb pH-n lejátszódik az amidnitrogének deprotonálódása és koordinálódása.

Megállapítottuk, hogy a Cu(II)-ion számára a ligandum N-terminális része a preferált kötőhely, míg a Ni(II)-ion ugyanilyen összetételű komplexében a fémion elsődlegesen az 5. pozícióban lévő imidazolgyűrűhöz koordinálódik.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NKFIH K115480 számú pályázatának támogatásával, valamint a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával készült.

Klopamid gyógyszerhatóanyag és réz(II)-komplexeinek szerkezetvizsgálata különböző kristályosítási körülmények között

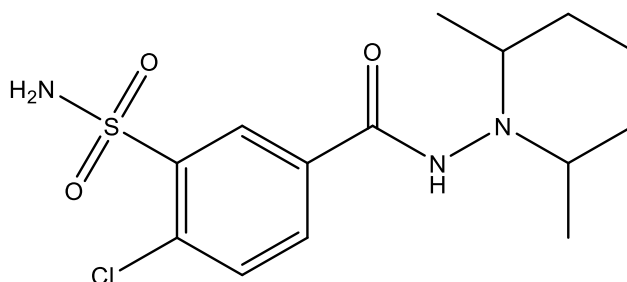
Gál Gyula Tamás, May Nóra, Bombicz Petra

MTA Természettudományi Kutatóközpont, Kémiai Krisztallográfiai Kutatólaboratórium

e-mail: gal.tamas@ttk.mta.hu

A klopamid egy forgalomban lévő gyógyszerhatóanyag, amely fokozza a vesékben a só és víz kiválasztását, ezáltal különböző ödémás állapotok, valamint enyhe és középsúlyos magas vérnyomás betegség (hipertónia) kezelésére szolgál.[1,2] A karbonil oxigén és a piperidin nitrogén a klopamid molekulán alkalmas fémkoordinációra.

A munkánk fő célja az volt, hogy meghatározzuk a klopamid, valamint réz(II)-*bis*komplexének egykristály-röntgenszerkezetét. A kristályosítási kísérletek során különböző körülményeket alkalmaztunk (pH, oldószer, ellenion), amely lehetővé tette, hogy különböző összetételű ($[\text{CuL}_2]$, $[\text{CuL}_2\text{H}]^+$ és $[\text{CuL}_2\text{H}_2]^{2+}$), valamint oldószer- és ellenion tartalmú egykristályokat állítsunk elő. Így tanulmányozni tudtuk a növekvő oldószerméret hatását az izostrukturális cellák méretére, valamint a kristályszerkezetben fellépő másodlagos kölcsönhatások változását különböző ellenionok jelenlétében. A réz(II)-komplexek szerkezetét DMSO oldatban is tanulmányoztuk ESR spektroszkópiával, és meghatároztuk a CuL - és CuL_2 komplexek ESR-paramétereit.



1. ábra: A vizsgált klopamid molekula szerkezete

- [1] B. Terry, G. Hirsch and J. B. Hook, *European Journal of Pharmacology*, **1968**, 4, 289-297.
[2] J. J. McNail, E. L. Conway, O. H. Drummer, L. G. Howes, N. Christophidis, W. J. Louis, *Clinical Pharmacology & Therapeutics*, **1987**, 42, 299-304.

Köszönetnyilvánítás: Köszönet a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal – NKFIH és az OTKA K115762 and K124544 projekteknek.

Peptid-hidroxi-piridinon konjugátumok szintézise és Pd(II)-komplexeinek vizsgálata

Ozsváth András^a, Diószegi Róbert^a, Bényei Attila^b, Buglyó Péter^a

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

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

A mai kemoterápiás gyakorlatban elterjedten alkalmazzák a ciszplatint, ami a szelektivitás hiányából adódóan számos mellékhatással rendelkezik. A szelektivitás növelhető, ha a Pt(II)-tartalmú komplex egy második, hordozó fémiont is tartalmaz, aminek segítségével a komplex célzottan a daganatos szövet(ek)ben fejtheti ki hatását. Ilyen kétfémes komplexek előállításához szükségünk van egy olyan ambidentát tulajdonságú ligandumra, mely képes mind a rákellenes hatásért felelős Pt(II), mind pedig a hordozó fémion (pl.: Co(III)) megkötésére is. Mivel jól ismert a Pt(II)- és Pd(II)-ionok nagy affinitása a peptidváz nitrogénjeihez,^[1] valamint a hidroxipiridinon származékok kiemelkedően erős fémionmegkötő képessége,^[2] ezen két vegyülettípus konjugátumai alkalmas jelöltek lehetnek szelektív, várhatóan rákellenes hatással bíró kétmagvú komplexek ligandumainak. A két fémiont tartalmazó koordinációs vegyületek előállítása kapcsán kulcsfontosságú megismerni az egyes fémionok donoratompreferenciáit, mely fontos szerepet játszik a komplex szintézisútvonalának tervezésénél. Éppen ezért munkánk során előállítottunk egy tripeptidhez kapcsolt piridinoszármazékot, az Ala-Gly-Gly-NH-Et-HP-t és tanulmányoztuk ezen ligandum oldatbeli kölcsönhatását Pd(II)-ionokkal pH-potenciometria, NMR és MS módszerek kombinált alkalmazásával. A fenti ligandummal tapasztalt összetett és érdekes komplexképződési folyamatok részletesebb feltérképezése, valamint mélyebb megértése érdekében a vizsgálatokba a DHP-t, mint modellvegyületet is bevontuk.

[1] Cs. G. Ágoston, T. K. Jankowska, I. Sóvágó; *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, **1999** 3295-3302.

[2] M. A. Santos, S. Chaves; *Future Medicinal Chemistry*, **2015** (7(3)) 383-410.

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

A tau fehérje két kötőhelyét modellező peptidek Cu(II) és Ni(II) komplexeinek oldategyensúlyi vizsgálata

*Lukács Márton^a, Szunyog Györgyi^a, Grenács Ágnes^a, Kállay Csilla^a, Giuseppe Di Natale^b,
Giuseppe Pappalardo^b, Várnagy Katalin^a, Sóvágó Imre^a, Csire Gizella^{a,c}*

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b CNR-Institute of Biostructures and Bioimaging

^c Université de Lorraine - CNRS Faculté des Sciences et Technologies Bvd des Aiguillettes

e-mail: lukacs.marton@science.unideb.hu

A neurodegeneratív megbetegedések molekuláris kémiai hátterét széles körben kutatják, azonban még mindig sok kérdés maradt megválaszolatlanul.^[1] Bizonyos azonban, hogy a betegségek hátterében egy jól meghatározott fehérje szerkezeti megváltozása áll, amelynek rendellenes viselkedése felelős a kóros állapot kialakulásáért. Közismert tény, hogy ezen szerkezeti változásokban átmeneti fémionok is részt vesznek.^[2] Az Alzheimer-kór esetében az amiloid- β molekula mellett a tau fehérje átalakulása is bekövetkezik, azonban a réz(II)ion pontos szerepe a folyamat során vitatott; mindazonáltal kötődése a makromolekulához megtörténik.^[3]

Ahhoz, hogy a molekuláris folyamatokat jobban megérthessük, és szélesítsük a meglévő tudásanyagot, támogatva a további vizsgálatokat, szükséges, hogy megismerjük a tau fehérje, mikrotubulusokhoz nem kötött, szabad N terminális részének koordinációs kémiai viselkedését. Ezért olyan modellpeptideket szintetizáltunk, amelyek a tau natív szerkezetében a 14. és 32. pozícióban található hisztidin aminosavakat tartalmazzák külön, illetve egy szekvencián belül, majd ezek Cu(II) és Ni(II) komplexeik oldategyensúlyi és spektroszkópiás vizsgálatát végeztük el. Megállapítottuk, hogy a két kötőhely közül a His32 nagyobb affinitással köti mindkét fémiont a fiziológias és gyengén lúgos tartományban.

[1] C. Ballatore, V. M. Y. Lee, J. Q. Trojanowski, *Nature Reviews*, **2007**, 8, 663-670

[2] D. R. Brown, H. Kozlowski, *Dalton Transactions*, **2004**, 13, 1907-1917

[3] J. S. Cristóvão, R. Santos, C. M. Gomes, *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*, **2015**, 2016, 1-7

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NKFIH K115480 számú pályázatának támogatásával, valamint a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával és az MTA (Magyarország)-CNR (Olaszország) kétoldalú együttműködési program keretében készült.

NiSOD enzimmodellek fémionszabályzó sajátságai

Lih Norbert^{a,b}, Csire Gizella^a, May Nóra Veronika^c, Várnagy Katalin^a,

Sóvágó Imre^a, Fábán István^{a,b}

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debreceni Egyetem

^c MTA Természettudományi Kutatóközpont, Kémiai Krisztallográfia Kutatólaboratórium

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

A szuperoxid-dizmutáz nikkelt tartalmazó enzimjében a szuperoxid gyökanion lebontása során a fémion oxidációs száma +2 és +3 között változik. Az enzim érdekessége, hogy a fémion megkötéséért felelős régióban számos, oxidációra érzékeny aminosav található meg, ugyanakkor az oxidáció/redukció mégis fémion központú. Emiatt maga az enzim és számos, az aktív centrumot modellező vegyülete széles körben vizsgált, ugyanakkor az enzim fémkötő szakaszának oldategyensúlyi, spektroszkópiai és redoxi vizsgálatáról kevés információ áll rendelkezésre.

Munkánk során emiatt célul tűztük ki a natív enzim fémkötő centrumának vizsgálatát, amelyet kiegészítettünk mutáns peptidszarmazékok tanulmányozásával is. Eredményeink alapján az enzim fémkötő centrumának fémionszabályzása az alábbiak szerint foglalható össze:^[1,2]

- (i) Az N-terminális aminocsoport a nikkell(II)ionok elsődleges kötőhelye, ennek hiányában a cink(II)-komplexek stabilitása 2-3 nagyságrenddel nagyobb, a megfelelő nikkell(II)-komplexekhez képest.
- (ii) A prolin cseréje alaninra az enzim aktív centrumát jellemző koordinációs környezetet kb. 1,5 pH egységgel a lúgosabb tartomány felé tolja, ugyanakkor a nikkell(III)-komplexek koordinációs módjában nincs különbség.

Az előadás során ezen hatások részletesebb tárgyalására kerül sor.

[1] N. Lih, G. Csire, B. Szakács, N. V. May, K. Várnagy, I. Sóvágó, I. Fábán, *Inorg. Chem.*, **2019**, *58*(2), 1414-1424.

[2] G. Csire, A. Kolozsi, T. Gajda, G. Pappalardo, K. Várnagy, I. Sóvágó, I. Fábán, N. Lih, *Dalton Trans.*, **2019**, DOI: 10.1039/C9DT01015G.

Köszönetnyilvánítás: A munka az NKFIH (PD 128326 és K 124983) 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.

Cisztein-tartalmú peptidok Ni(II)-komplexei

Szunyog Györgyi, Várnagy Katalin

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

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

Egyes fémionokhoz, köztük a nikkell(II)ionhoz az emberi szervezetben nem társítottak létfontosságú szerepet, de mikroorganizmusokban, baktériumokban számos enzim szükséges alkotóeleme (pl. Ni-SOD enzim, CO-dehidrogenáz, ureáz enzim...), így nem zárható ki, hogy nagyon kis koncentrációban akár az emberi szervezetben is lehet létfontosságú szerepe [1].

Munkám során az volt a cél, hogy olyan peptidet állítsak elő, amelyek nagy stabilitással képesek kötni a nikkell(II)iont. Az egyik legjobb kötőhely a nikkell(II)ion számára a cisztein oldalláncbeli tiolátcsoportja, de a keletkező komplexek stabilitását befolyásolja a ciszteinek száma, helyzete és a terminális aminocsoport jelenléte. Ennek vizsgálatára három két ciszteint tartalmazó (CSSACS-NH₂, ACSSACS-NH₂ és SSCSSACS-NH₂) peptidet szintetizáltunk és elvégeztük azok Ni(II)-komplexeinek oldategyensúlyi jellemzését.

Ha a peptid N-terminális pozícióban tartalmazza a ciszteint, akkor a fő komplex [NiH₂L₂], de nagyobb pH-n a csapadékképződés miatt a pH-potenciometria nem volt alkalmazható. A második helyen ciszteint tartalmazó peptid esetén az N-terminális rész a fő kötőhely a Ni(II)-ion számára. Mivel a fémion koordinációs szférája nem telítődik, így ligandumfeleslegnél biszkomplex képződik. A harmadik helyen ciszteint tartalmazó peptid esetén szintén az N-terminális rész a fő kötőhely, ám erősen lúgos tartományban a C-terminális tiolátrész is verseng a nikkell(II)ion megkötéséért, de ezen koordinációs izomer aránya csak kb. 10%. Fémion felesleg jelenlétében az ACSSACS-NH₂ és az SSCSSACS-NH₂ peptideknél is mind az N-terminális rész, mind a C-terminális tiolátcsoport kötőhelyet jelentenek a fémionok számára, így lehetőség van kétmagvú komplexek képződésére.

[1] H. Sigel, A. Sigel, *Metal Ions in Biological Systems*, **1988**, 23, 1-488.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NKFIH K115480 számú pályázatának támogatásával, valamint a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával készült.

Királis, ötfogú N-donor ligandumokat tartalmazó vas-, mangán-, és réz-tartalmú enzimmodellek vizsgálata vizes rendszerekben

Kripli Balázs, Sólyom Bernadett, Kaizer József, Speier Gábor

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

e-mail: balazskripli@gmail.com

Az élő szervezetben felhalmozódó reaktív oxigén származékok ($\cdot\text{OH}$, $\text{O}_2^{\cdot-}$...) különféle gyulladáshoz vezető megbetegedésekhez vezethetnek. A kataláz enzimek az egyik legfontosabb védelmi funkciót ellátó enzimek a szervezetünkben. A különböző biológiai folyamatokban felhalmozódó hidrogén-peroxidot dioxigénné és vízzé alakítják át. A fenti enzim funkcionális modelljeként korábban vizsgálták a vas(IV)-oxo intermedierek szerepét a hidrogén-peroxid bontási folyamatában különböző pufferoldatokban.^[1,2]

Kutatócsoportunkban korábban prekursor Mn(II)-, Fe(II)-, és Cu(II)-komplexeket állítottak elő, amelyekhez az alábbi szerkezetű ligandumokat, az asN4Py (N4Py = *N,N*-bisz(2-piridilmetil)-1,2-di(2-piridil)-etil-amin) és az asN2Py2Q2 (N2Py2Q2 = *N,N*-bisz(2-kinolinilmetil)-1,2-di(2-piridil)-etil-amint) használtak fel. A jelenlegi munka során ezeknek a prekursor vegyületeknek és az abból képzett magas oxidációfokú intermediereknek a stabilitását és reaktivitását vizsgáltuk hidrogén-peroxiddal, mint szubsztráttal szemben. A katalitikus reakciókat gázvolumetrikus módszer segítségével végeztük el pH 7 és pH 11,5 közötti vizes pufferoldatokban a képződő dioxigén követésén keresztül.

A reakció elemi lépéseit UV-VIS spektroszkópiával követtük. A jodozobenzol oxidálószer segítségével intermediereként kialakult Mn(IV)-oxo és Fe(IV)-oxo intermedierek stabilitását és reaktivitását vizsgáltuk pH 7 és pH 11,5 közötti vizes pufferoldatokban. Az elvégzett mérések alapján a feltételezett reakciómechanizmusra is javaslatot tettünk.

[1] Braymer J.J., O'Neill K.P., Rohde J.U., Lim M.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: A GINOP-2.3.2-15-2016-0049 kutatási pályázat által nyújtott támogatásért.

Királis, kéntartalmú heterodonor ligandumok szintézise, koordinációs és katalitikus tulajdonságai

Major Máté Miklós^a, Rövid Gergő^a, Lendvay György^b, Balogh Szabolcs^c, Bényei Attila^d, Bakos József^a, Farkas Gergely^a

^a Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

^b Magyar Tudományos Akadémia, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

^c Pannon Egyetem, NMR Laboratórium

^d Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

e-mail: miklos.mate.major@gmail.com

A molekuláris kiralítás pontos szabályozása rendkívül fontos szerepet játszik a gyógyszerek és növényvédőszer szintézisében. Az optikailag aktív vegyületek előállításához elterjedten használnak aszimmetrikus átmenetifém-komplex katalizátorokat. Korábban jelentős eredményeket értek el heterodonor bi- és tridentát foszfin-, foszfit- és aminocsoportokat tartalmazó ligandumok alkalmazásával. A foszfor helyett kén donoratomot tartalmazó ligandumok szintézise azonban gyakran egyszerűbb, továbbá az aszimmetrikus tioéter vegyületek koordinációja során új sztereocentrum képződik, amely jelentősen növelheti a katalizátor szelektivitását. Megállapítottuk, hogy a különböző alkán-diil vázas ligandumokkal módosított átmenetifém-komplexek szterikus és elektronikus tulajdonságainak finomhangolásával kiemelkedő aktivitás és szelektivitás érhető el. Ezen ismeretekre alapozva nagy hatékonyságú és moduláris szintetikus eljárást fejlesztettünk ki kéntartalmú heterodonor ligandumok előállítására, valamint sikeresen alkalmaztuk e vegyületek fémkomplexeit aszimmetrikus katalitikus reakciókban.^[1]

[1] Major, M. M.; Rövid, G.; Balogh, S.; Bényei, A.; Lendvay, G.; Frigyes, D.; Bakos, J.; Farkas, G.; *Appl. Organomet. Chem.*, **2018**, *33*, 4726.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NKFIH K 115539 és K 128074 projektek keretében, utóbbi pályázat az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. „Az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült”



Kelát és kétmagvú átmenetifém-di-N-heterociklusos karbén komplexek

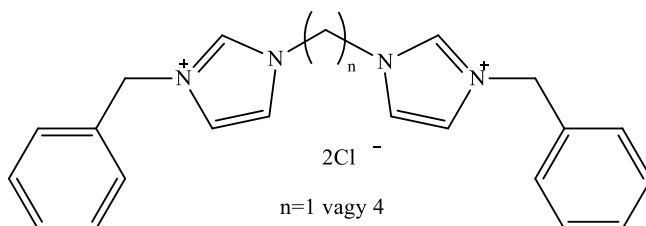
Czégéni Csilla Enikő^a, De Sourav^b, Orosz Krisztina^b, Horváth Henrietta^a, Joó Ferenc^{a,b}

^a MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

^b Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék,

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

Kutatócsoportunkban már régóta foglalkozunk stabil egyfogú N-heterociklusos (NHC) mono- és bisz-karbén-komplexek előállításával és vizsgálatával. Az irodalomban közölt NHC ligandumok többsége egyfogú ligandum,^[1] és csak kevesebb kétfogú di-N-heterociklusos ligandum ismert.^[2,3] Ezért célul tűztük ki di-N-heterociklusos átmenetifém karbén komplexek előállítását. Rh(I)-, Ir(I)- és Au(I)- (kelát és/vagy kétmagvú) komplexeket állítottunk elő. A kétmagvú Rh(I)-di-NHC-komplexet a megfelelő diimidazólium só, [RhCl(COD)]₂ és kálium-karbonát jelenlétében nyertük oldószerben, illetve oldószer nélkül golyósmalomban. A Rh(I)-di-NHC-kelát-komplexet ezüst-NHC-karbén komplexen keresztül történő transzmetallálással kaptuk. A komplexek szerkezetét spektroszkópiásan jellemeztük, valamint a kétmagvú Rh(I)-karbén-komplex szerkezetét egykristály röntgendiffrakciós mérés is alátámasztja. Az előállított karbén komplexek katalitikus tulajdonságait különböző reakciókban tanulmányoztuk.



1.ábra: A vizsgált kétfogú di-N-heterociklusos ligandum képlete

[1] N. Kuhn, A. Al-Sheikh, *Coord. Chem. Rev.*, **2005**, 249, 829.

[2] S. Burling, L.D. Field, H. L. Li, B.A. Messerle, P. Turner, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2003**, 3179.

[3] Y.A. Wanniarachchi, M.A. Khan, L.M. Slaughter, *Organometallics*, **2004**, 23, 5881.

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 és NKFI-FK128333) is.

Antibakteriális hatású biomolekulák fémkomplexeinek előállítása és vizsgálata

*Kozsup Máté^a, Darren Griffith^b, Donal M. Keogan^b, Brendan Twamley^c, Farkas Etelka^a,
Buglyó Péter^a*

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Royal College of Surgeons in Ireland, 123 St. Stephen's Green, Dublin

^c Trinity College Dublin, The University of Dublin, Dublin

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

A kemoterápiás kezelés következtében legyengült szervezet antibakteriális kezelése elengedhetetlen. Ezen folyamat hatásfoka növelhető lehet, amennyiben az antibiotikumot célzottan a terápia során érintett rákos szövetekhez juttatjuk. Ehhez olyan hordozó molekulára van szükség, amely inaktív formában tartja a bioligandumot, amíg az a tumorba ér. Ilyen szempontból lehetnek alkalmazhatóak az inert Co(III) komplexek, amelyek szelektíven csak a rákos sejtben lévő oxigénhiányos állapot (hipoxia) hatására redukálódhatnak, így labilis Co(II) komplex keletkezhet. Ez lehetővé teszi az antibakteriális hatású bioligandum célzott felszabadulását a tumorban.

A Co(III) 4 koordinációs helyét erősen koordinálódó N-donor atomokat tartalmazó tripodális aminok foglalják el. A fémion szabadon maradt két koordinációs helyét pedig az önmagukban is antibakteriális hatású, leginkább O,O donor ligandumok foglalhatják el, melyek a rákos sejtben felszabadulva fejthetik ki hatásukat.

Munkánk során a bizonyítottan antibakteriális hatású GSK322 molekula, illetve az ezt modellező HFA (N-hidroxi-N-fenilformamid) ligandumokat tartalmazó Co(III) és Bi(III) komplexek szilárd fázisban történő előállításával és vizsgálatával foglalkoztunk, az előadás az elért eredményeket mutatja be.

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

Elágazó láncú aminosavakból képződő klóraminok bomlása

Simon Fruzsina^a, Bíró Vivien^a, Szabó Mária^a, Fábíán István^{a,b}

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

simon.fruzsina@science.unideb.hu

Az utóbbi években az *in vivo* folyamatok és a környezetkémiai kutatások tárgyát képezik a hipoklórossav reakciói aminokkal, aminosavakkal és peptidekkel. Ezek a reakciók különböző *N*-klóraminok kialakulásához vezetnek különböző körülmények között. Az *N*-klóraminok képződése a biológiai rendszerekben kiemelkedő jelentőségű, mivel a sejtfalon történő áthatolás után ezek a molekulák oxidatív stresszt váltanak ki, ami a sejtek pusztulásához vezet. Az általunk vizsgált három esszenciális aminosav a leucin, izoleucin és valin, összefoglaló néven elágazó láncú aminosavak (BCAA: Branched Chain Amino Acids), amik jelentős antikatabolikus és anabolikus hatással bírnak az izomszövet állományra.

A megfelelő *N*-klóraminosavak gyors folyamatban képződnek a hipoklórossav és a leucin, az izoleucin, valamint a valin közötti reakciókban. Ezek a reakciók a HOCl-re és az aminosavak deprotonált formájára nézve egyaránt elsőrendűek. Az így képződött klóraminok nem stabilak, bomlásukat spektrofotometriás módszerrel, a megfelelő abszorpciós maximumon követhetjük. A spektrális változás alapján elmondható, hogy a három elágazó láncú aminosav bomláskinetikája hasonló az adott kísérleti körülmények között. A reakció minden esetben két reakcióúton játszódik le, melyek közül az egyik sebessége független a pH-tól a másiké pedig lineárisan nő a hidroxidion koncentrációjának növelésével.

Céljaink között szerepelt a bomlási folyamatok mechanizmusának felállítása, az intermedierek és termékek szerkezetének igazolása ¹H NMR vizsgálatok alapján.

Köszönetnyilvánítás: Az anyagi forrásért köszönetet mondok az OTKA K 124983 számú pályázatnak.

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-18-3. kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

A Richter Gedeon Talentum Alapítvány (1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.) anyagi támogatásával jött létre.

Catalytic Oxidation of *N,N*-dimethylaniline via Mn(IV)-Oxo intermediate

Bashdar Ismael, Kripli Balázs, Kaizer József, Speier Gábor

University of Pannonia, Organic Department, H-8200 Veszprém

e-mail: bashdarismael@gmail.com

High-valent metal-oxo complexes play important role as reactive intermediates in many biological and biomimetic processes.^[1,2] In this study, we set out to explore the catalytic reactivity of the complexes [Mn^{II}(asN4Py)(CH₃CN)](CF₃SO₃)₂ (**1**) and [Mn^{II}(py)₂indH]Cl₂ (**2**). They have been shown to catalyze the oxidation of *N,N*-dimethylaniline (DMA) with peracetic acid (PAA), hydrogen-peroxide (H₂O₂), *meta*-chloroperoxybenzoic acid (mCPBA), *tert*-butyl hydroperoxide (TBHP) and iodosobenzene (PhIO) resulting *N*-methylaniline (MA) as the predominant product with *N*-methylformanilide (MFA). The product composition (MA/MFA) remarkably influenced by the electron density on the substrate, especially in the **1**/mCPBA system, and by the co-oxidants used.

Based on spectral investigation (UV/Vis) [Mn^{IV}(asN4Py)(O)]²⁺ (**3**) intermediate (λ_{\max} = 944 nm; ϵ =250 M⁻¹cm⁻¹) has been suggested to be the key active species of the *N*-dealkylation reaction. The highest selectivities have been found for mCPA (MA/MFA = 3.3) and PhIO, where no formation of MFA occurred during the oxidation. Based on spectroscopic and kinetic investigations on the catalytic and stoichiometric systems we have found a direct and convincing proof for the formation of high-valent Mn^{IV}(O) species as a key intermediate in the catalytic cycle. Based on kinetic measurements electron transfer and proton transfer (ET-PT) mechanism can be proposed.

[1] H. Yoon, Y. Morimoto, Y.-M. Lee, W. Nam, *Chem. Commun.* **2012**, 48, 11187.

[2] X.-X. Li, Y. Wang, Q.-C. Zheng, H.-X. Zhang, *J. Inorg. Biochem.* **2016**, 154, 21.

Multifunctionalized p-cymene ruthenium (II) compounds as promising new antineoplastic agents

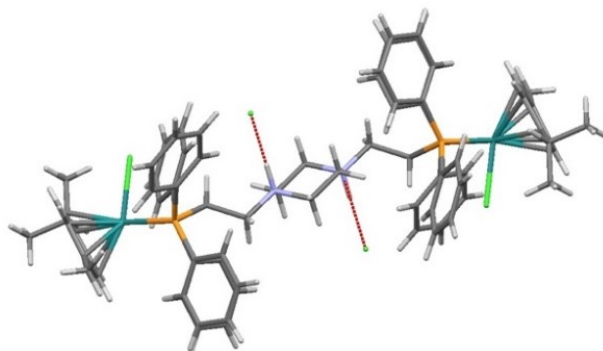
Jorge Lado^{a,b}, *Jesus J. Fernandez*^a, *Alberto A. Fernandez*^a, *Digna Vazquez-Garcia*^a,
Margarita Lopez-Torres^a, *István Pálinkó*^b, *Pál Sipos*^b

^a Centro de investigaciones Científicas Avanzadas (CICA), E-15008, Universidade da Coruna, Spain

^b Institute of Chemistry, University of Szeged, 7 Dom Ter, H-6270 Szeged, Hungary
e-mail: jorge.lado.s@chem.u-szeged.hu

Cis-[Pt(NH₃)₂Cl₂] is considered as one of the most effective chemotherapeutic agents in medicine, but its clinical applications are limited by primary or acquired drug resistance, high toxicity and severe secondary effects.^[1] The search for alternative compounds derived from transition metals and the study of its biological behavior is highly searched in the whole world. One of these alternative elements is ruthenium, especially compounds with p-cymene as organometallic bond.^[2]

In this work, the synthesis of ruthenium (II) complexes derived from cyclometalated and post-coordination functionalized diphosphines was made; and its biological activity was tested, either for *in vitro* and *in vivo* studies or the binding to a biological target; in this case, human seroalbumin (HSA).



[1] Daya Shankar Pandey et al., *Dalton Transactions*, **2016**, 45, 7163

[2] Dyson, P. J.; Curt A. et al, *Nature Communications*, **2014**, 5, 3462

Acknowledgements: We highly appreciate the financial support of Xunta de Galicia, under Grupos de Referencia Competitiva Programme (Project reference GRC2014/042) and grant number NKFIH K 124265.

Homogén katalízis kutatások „debreceni vizekben” – 22 év

Papp Gábor^a, ...sokan mások^{a,b}, Joó Ferenc^{a,b}

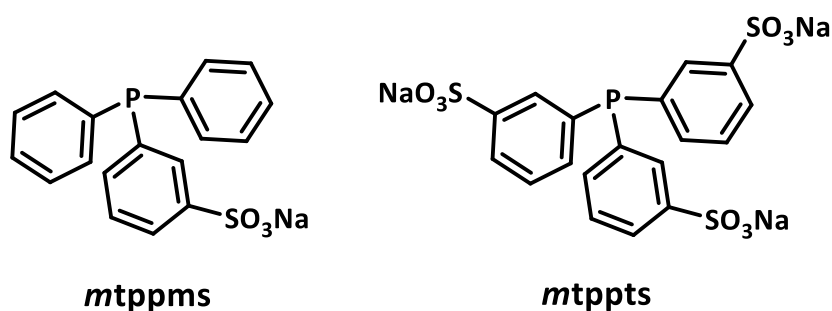
^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

^b MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

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

A Debreceni Egyetem (korábban Kossuth Lajos Tudomány Egyetem) Fizikai Kémiai Tanszékén az 1970-es években kezdődtek meg a vizes közegű homogén katalitikus rendszerek vizsgálatával foglalkozó kutatások. Az azóta eltelt mintegy fél évszázadban az egyik legmeghatározóbb ligandum a trifenil-foszfin szulfonált származéka a *mtpms* (monoszulfonált trifenil-foszfin – 1. ábra). Átmenetifém (Ru, Rh, Ir, stb.) komplexeinek előállításával és homogén katalitikus alkalmazásával a vizes közegű fémorganikus kémiában elért eredmények az egyszerűbb hidrogénezési reakciókon és a *para*-hidrogén alkalmazásán túl a biztonságos hidrogéntárolás megoldására tett javaslatig kiemelkedő jelentőségűek mind a hazai mind pedig a nemzetközi tudományos életben.

Ezen a kutatási területen végzett összefoglaló előadást Joó Ferenc akadémikus, professzor emeritus munkásságának és 70. születésnapjának tiszteletére ajánlom.



1. ábra: Szulfonált trifenil-foszfinok

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-FK128333.

Vízoldható Ir(I)-NHC-foszfin komplexek előállítása és alkalmazásuk homogén katalitikus hidrogénezésben és hidrogéntárolásban

*Horváth Henrietta^b, Papp Gábor^a, Kovács Henrietta^a, Orosz Krisztina^a, Kathó Ágnes^a,
Joó Ferenc^{a,b}*

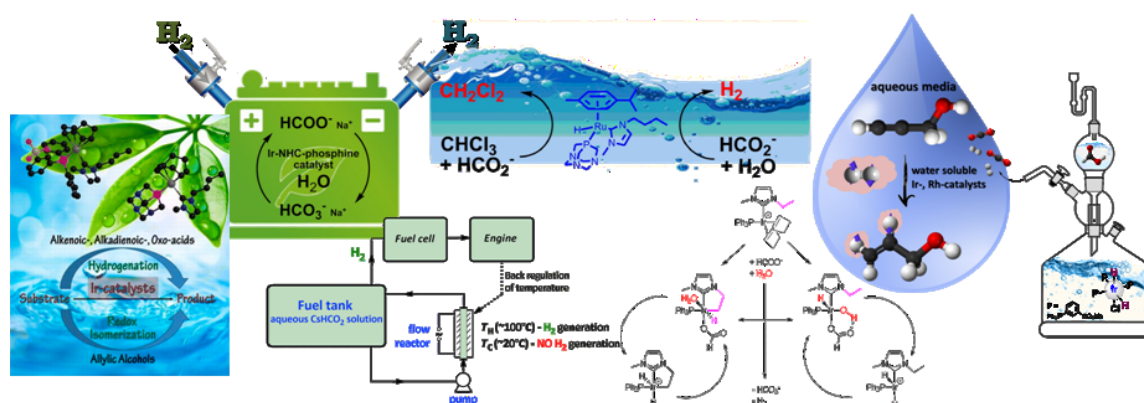
^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék,

^b MTA-DE Redox és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport

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

Az elmúlt évtizedben intenzív kutatásokat folytattunk különböző átmenetifém (Ru, Rh, Ir) NHC, ill. NHC-foszfin komplexek előállítása, katalitikus tulajdonságainak vizsgálata területén. Az előállított új, vízoldható Ir-karbén komplexek nemcsak különböző hidrogénezési folyamatokban mutattak kiemelkedő aktivitást. Alkalmazásukkal a mindennapi élet egyik, a jövőbeni energiaellátás alapproblémájára is megoldást tudunk javasolni, batch ill. áramlós rendszerben szabályozható és biztonságos hidrogéntároló rendszer kialakításával.

Ezen a kutatási területen végzett összefoglaló előadást Joó Ferenc akadémikus, professzor emeritus munkásságának és 70. születésnapjának tiszteletére ajánlom.



1. ábra: Átmenetifém-komplexek a vizes közegű homogén katalízisben

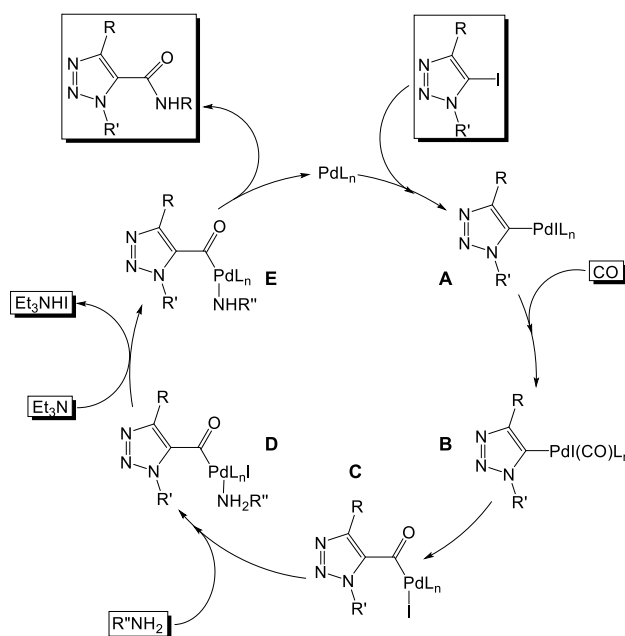
Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP-2.3.2-15-2016-00008 számú projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs alaphoz NKFI-FK128333.

N-Heterociklusos vegyületek szintézise átmenetifém-katalizált reakciókbanSzuroczki Péter^a, Takács Attila^b, Kollár László^{a,b}^a Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Szervetlen Kémiai Tanszék^b MTA-PTE Szelektív Kémiai Szintézisek Kutatócsoport

e-mail: kollar@gamma.ttk.pte.hu

A palládium-katalizált aminokarbonilezési reakció^[1-3] felfedezése óta a szintetikus kémia egyik leggyakrabban alkalmazott homogénkatalitikus reakciójává vált.^[4-8]

Előadásunkban mind az egyszerű jó-d-szubsztituált heteroaromások amid-csoportjának kiépítésével (ábra), mind a heterociklusos gyűrűzárási, és azt követő funkcionálizálási reakciójával foglalkozunk. Kihhasználva a szén-monoxid beékelődése után kapott Pd(II)-acil komplex (pl. az alábbi katalitikus ciklus **E** intermedierje) rendkívüli acilező képességét, farmakológiai fontosságú, primer és szekunder amin szerkezeti részletet tartalmazó alapvázak (nortropánok, amino-penicillánsav és -kefalosporin) acilezési reakcióiról is beszámolunk.

[1] Schoenberg, A.; Bartoletti, I.; Heck, R. F. *J. Org. Chem.* **1974**, *39*, 3318-3326.[2] Schoenberg, A.; Heck, R. F. *J. Org. Chem.* **1974**, *39*, 3327-3331.[3] Schoenberg, A.; Heck, R. F. *J. Am. Chem. Soc.* **1974**, *96*, 7761-7764.[4] Wu, X.-F.; Neumann, H. *ChemCatChem*, **2012**, *4*, 447-458.[5] Liu, Q.; Zhang, H.; Lei, A. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 10788-10799.[6] Yan, G.; Wu, X.; Yang, M. *Org. Biomol. Chem.* **2013**, *11*, 5558-5578.[7] Wu, L.; Fang, X.; Liu, Q.; Jackstell, R.; Beller, M.; Wu, X.-F. *ACS Catal.* **2014**, *4*, 2977-2989.[8] Kiss, M.; Takács, A.; Kollár, L. *Curr. Green Chem.* **2015**, *2*, 319-338.

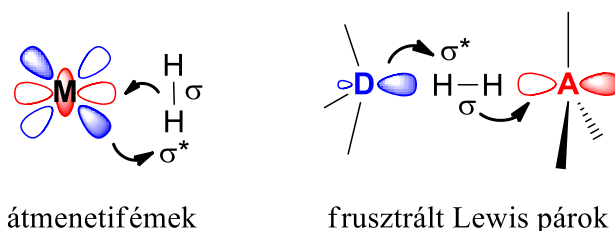
Homogén katalitikus hidrogénezés átmeneti fémekkel és anélkül

Pápai Imre

^a MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet, Elméleti Kémiai Kutatócsoport

e-mail: papai.imre@ttk.mta.hu

Régóta ismert, hogy az átmenetifémek a részlegesen betöltött d-pályáiknak köszönhetően a molekuláris hidrogént könnyen és reverzibilisen aktiválják (hasítják), és emiatt kitűnően használhatók katalizátorként hidrogénezési eljárásokban. Analóg H₂ aktiválási folyamat valósítható meg az ún. frusztrált Lewis párok (FLP) segítségével is, és ez fémmentes katalizátorok tervezésére ad lehetőséget.



Előadásomban néhány példával szeretném illusztrálni, hogy az elméleti kémia eszköztárával miképp járulhat hozzá a reakciómechanizmusok feltárásához és új katalizátorok tervezéséhez. Szó lesz vízoldható Rh(I) és Ru(II) komplexek által katalizált hidrogénezési folyamatok mechanizmusáról,^[1,2] az FLP-féle reaktivitás értelmezéséről,^[3] és néhány újfajta hidrogénezési eljárásról is.^[4,5]

[1] G. Kovács, G. Schubert, F. Joó, I. Pápai, *Organometallics*, **2005**, *24*, 3059

[2] G. Kovács, G. Schubert, F. Joó, I. Pápai, *Catalysis Today*, **2006**, *115*, 53

[3] T. A. Rokob, I. Bakó, A. Stirling, A. Hamza, I. Pápai, *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, *135*, 4425

[4] K. Chernichenko, Á. Madarász, I. Pápai, M. Nieger, M. Leskelä, T. Repo, *Nat. Chem.*, **2013**, *5*, 718

[5] Á. Gyömöre, M. Bakos, T. Földes, I. Pápai, A. Domján, T. Soós, *ACS Catal.*, **2015**, *25*, 5366

Köszönetnyilvánítás: Köszönet a projektekben résztvevő munkatársaknak és az együttműködő partnereknek. Kedves Ferenc! Boldog születésnapot!

Fémionok által szabályozott mesterséges nukleázok

Gyurcsik Béla^a, Hajdu Bálint^a, Abd Elhameed Heba^a, Bal Wojciech^b, Nagata Kyosuke^c

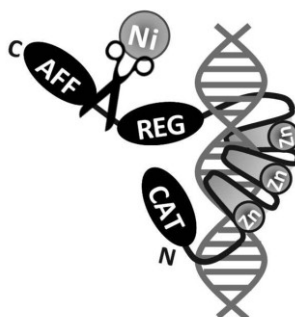
^a Szegedi Tudományegyetem, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Polish Academy of Sciences, Institute of Biochemistry and Biophysics, Warsaw, Poland

^c University of Tsukuba, Nagata Special Laboratory, Tsukuba, Japan

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

A specifikus mesterséges fehérjealapú nukleázok alkalmasak lehetnek génhibák javítására vagy gének módosítására a genomiális DNS, nukleáz által felismert és elhasított helyén DNS-javító mechanizmusokat indukálva. Biztonságosan működő mesterséges nukleázok a természetes enzimek mintájára intramolekuláris allosztérikus szabályozással alakíthatók ki. Kutatócsoportunk az NCoIE7 metallonukleázon keresztül tanulmányozza a DNS hasítás regulációját.



Fehérjék tisztítására gyakran alkalmazott eljárás az affinitás kromatográfia, melynek egyik legelterjedtebb változata az oligohisztidin toldalék fémion-affinitásán alapszik. Egy ilyen, Ni(II)-ionok segítségével hidrolizálható, 6×His toldalékot tartalmazó fehérje előállítási eljárásának optimalizálása során [1] tapasztaltuk, hogy a toldalék nagymértékben befolyásolja a metallonukleáz fémion-kötő és katalitikus sajátságait. Ez lehetőséget nyújt a nukleáz aktivitás ki/bekapcsolására, illetve finomhangolására fémionok segítségével.

[1] H.A.H. Abd Elhameed, B. Hajdu, R.K. Balogh, E. Hermann, É. Hunyadi-Gulyás, B. Gyurcsik, *Protein Exp. Pur.* **2019**, 159, 53–59.

Köszönetnyilvánítás: A projektet támogatták: GINOP-2.3.2-15-2016-00038, NKFIH K_16/120130 és az MTA-JSPS bilaterális együttműködési séma.

Rögzített ionfolyadék hordozók alkalmazása újrahasználatos palládium katalizátorok kialakítására

Papp Máté, Urbán Béla, Adamcsik Bernadett, Fütyű Júlia, Skodáné Földes Rita

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

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

A karbonilezési reakciók során palládium katalizátorok segítségével új szén-szén kötések alakíthatók ki a szén-monoxid aktiválása révén. A módszerrel értékes karbonilvegyületek vagy karbonsavszármazékok közvetlen szintézisére nyílik lehetőség egyszerű kiindulási vegyületek (pl. aril-halogenidek) felhasználásával. A módszer mégsem terjedt el a finomkémiai iparban, elsősorban az átmenetifém-katalizátorok magas ára miatt.

A hordozóhoz rögzített, újra felhasználható katalizátorok nem csak a katalitikus reakciók kivitelezésének költségeit, hanem a termékbe szennyezésként kerülő fém mennyiségét is csökkentik, ezáltal a termék tisztítását is egyszerűsítik. A nyerstegek alacsony fémtartalma különösen kívánatos a gyógyszeripari felhasználások esetén.

A hordozó felületének egyik módosítási lehetősége ionfolyadékok rögzítése adszorpcióval vagy kovalens kötések segítségével. A szilárd fázishoz kötött ionok megőrizhetik az ionfolyadékok átmenetifém-komplexek vagy nanorészecskék stabilizálásában mutatott kedvező tulajdonságait. Ugyanakkor a felületen lévő ionok minősége jelentősen befolyásolhatja a katalizátorok aktivitását, a karbonilezés szelektivitását illetve a szükséges reakciókörülményeket. Az elmúlt évek során számos imidazólium-, piridínium- és foszfónium ionokkal módosított hordozót állítottunk elő, amelyek segítségével sikerült megfelelően stabil palládium-tartalmú katalizátorokhoz jutnunk. Az előadásban bemutatunk néhány példát olyan heterogén rendszerekre, amelyek a reakciókörülmények változtatásával akár amidokhoz vezető mono-, akár α -ketoamidok képződését eredményező kettős karbonilezésben alkalmazhatók és többször felhasználhatók minimális fémlomosódás mellett.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a GINOP -2.3.2-15-2016-00049 projekt támogatásával valósult meg.

Szilikáttartalmú vegyületek oldódási kinetikájának vizsgálata ipari körülmények között

Orbán Eszter^a, Szabados Márton^b, Pálinkó István^b, Sipos Pál^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Dóm tér 7.

^b Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék, Dóm tér 8.

e-mail: eszterorban94@gmail.com

Az alumíniumiparban használt Bayer-eljárás egyik legkomolyabb technológiai problémája a bauxitban fellelhető reaktív szilika okozta jelentős anyagveszteség. Ennek oka, hogy az oldott szilíciumvegyületek reakcióba lépnek az alumíniummal és a nátrium-hidroxiddal és az így képződő termék a vörösiszap alkotóelemeiként eltávozik a folyamatból.^[1] A problémát úgy próbálják kiküszöbölni, hogy alacsonyabb hőmérsékleten (95°C) az ún. előszilikátmentesítő eljárás (*pre-desilication*) során olyan anyagot adagolnak a szuszpenzióba, mely reakcióba lép a reaktív szilikával és csökkenti a vörösiszap mennyiségét, így növelve meg a folyamat kitermelését.^[2]

A technológia optimalizálásához vezető úton elsőként egy olyan rendszer kiépítésére volt szükség, amellyel reprodukálható, megbízható kinetikai méréseket tudunk végezni. Az általunk megtervezett berendezéssel stabilan tudjuk tartani a $95,0 \pm 0,5^\circ\text{C}$ -ot, a 6 óra utáni párolgási veszteséget 1% körülire tudtuk lecsökkenteni, és a reprodukálhatósági kísérletek is sikeresnek bizonyultak.

Ezt követően öt különböző forrásból származó kaolinit minta oldódási kinetikáját vizsgáltuk a fent leírt berendezésben, követve a szilíciumkoncentráció időbeli változását. Az egyes minták eltérő oldódási kinetikája okainak feltérképezése szintén munkánk részét képezte, így számos vizsgálati módszerrel tanulmányoztuk az általunk felhasznált szilárd anyagokat és a 6 órán át végzett beoldódási kísérleteket követően keletkező termékeket. Ennek alapján javaslatot tehetünk az eltérő oldódási kinetika fizikai-kémiai okaira.

[1] P. Smith, *Hydrometallurgy*, **2009**, 98, 162-176.

[2] B.I. Whittington, C.M. Cardile, *Int. J. Miner. Process.*, **1996**, 48, 21-38.

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönik a pénzügyi támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak (Grant NKFIH 124 265).

Na-citrát hatása gipsz kristályosodására erősen túltelített oldatból

Ziegenheim Szilveszter^a, Slam Szintia^a, Sipos Pál^a, Pálinkó István^b

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

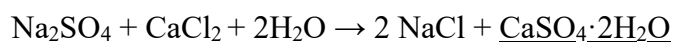
^b Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék

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

A kalcium-szulfát-dihidrát ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; gipsz) kiválása számos folyamat során okozhat komoly technológiai problémákat. Geotermikus fűtést használó rendszerekben, illetve az olajfúrások során is ez a csapadék az egyik leggyakoribb vízkőképző, kicsapódása nagymértékben csökkenti az eljárások hatásfokát. Emiatt napjainkban is fontos és széles körben kutatott téma a gipsz kristályosodásának szabályozása illetve inhibíciója.

A szakirodalom alapján a legjobban működő inhibitorok a foszfonátok és a több karbonsav-csoportot tartalmazó adalékok. Az egyszerű karbonsavak közül kiemelkedik a citromsav. Emellett könnyen beszerezhető és környezetbarát anyagról van szó, így mi is ezt választottuk kutatásunk tárgyának.

Kísérleteink során a gipszet a következő reakcióban választottuk le:



A reaktánsok kiindulási koncentrációját ipari folyamatokat megközelítően magasra állítottuk be, és a rendszert folyamatosan nagy sebességgel kevertettük. A reakciókban szisztematikusan változtattuk a Na-citrát koncentrációját. A reakciókat két *in-situ* mérési módszerrel, vezetőképesség méréssel és Ca-ionszelektív elektróddal kíséreltük meg követni. A reakció végeztével a szilárd anyagot leszűrtük, szárítottuk, majd szerkezeti és morfológiai változásait porröntgen-diffraktometriával (pXRD) és pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM) vizsgáltuk. Végezetül a szűrlet UV-látható spektroszkópiái és a szilárd anyag IR-spektroszkópiái vizsgálatával meghatároztuk, hogy a reakció után hol található az inhibícióhoz felhasznált citrát.

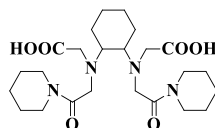
A [Mn(CD2A2AM^{Pip})]-komplex szerkezeti izomerjeinek elválasztása és koordinációs kémiai jellemzése

Garda Zoltán, Kálmán Ferenc Krisztián, Madarasi Enikő, Váradi Balázs, Tóth Imre, Tircsó Gyula
Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

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

A 2000-es évek elején megrendült a Gd(III)-tartalmú MRI kontrasztanyagokba vetett bizalom. Ennek több oka van, de a legnagyobb visszhang a Nefrogén Szisztémás Fibrózis (NSF)^[1] betegség megjelenéséhez köthető, melyet a Gd(III)-ion alapú MRI kontrasztanyagok használata váltott ki veseelégtelenségben szenvedő pácienseknél. A problémát az tetőzte, hogy az egészséges vesefunkcióval rendelkező páciensek esetén is kimutattak gadolínium felhalmozódást az egyes szervekben (többek között az agyban is).^[2] Az MRI kontrasztanyagok körül kialakult helyzet hatására nagyon intenzív kutatás indult világszerte olyan új kontrasztanyagok fejlesztésére, melyek kevésbé toxikusak az emberi szervezet számára. Ezen kutatásokhoz csatlakozva a kutatócsoportunkban előállítottuk a CD2A2AM^{Pip} ligandumot (1. ábra) és vizsgáltuk a Mn(II)-ionnal képződő komplexének oldategyensúlyát, ill. kinetikai és relaxometriás viselkedését.

A vizsgálatokat a ligandum protonálódási állandóinak, valamint a Mn(II)-komplex protonálódási és stabilitási állandóinak meghatározásával kezdtük. Ezt követően Cu(II)-csere reakciók segítségével próbáltunk információt nyerni a komplex kinetikai inertségéről, amikor is azt tapasztaltuk, hogy az egy exponenciális burkológörbék nem illeszthetők tökéletesen a mért idő-abszorbancia adatpárokra (két exponenciálissal viszont jól leírhatók). HPLC tisztaságú ligandumból készített Zn(II)- és Mn(II)-komplexek HPLC vizsgálata három egymásba szokatlanul lassan átalakuló izomer jelenlétét tárta fel. A preparatív HPLC technikával elválasztott Mn(II)-izomerkomplexeket NMR (Zn(II)-izomerkomplexek), MS, ill. ¹H-relaxometriásan jellemeztük, és a kinetikai viselkedésüket külön-külön is vizsgáltuk. Az eredményeink alapján a három izomer közül kettő inertsége lényegesen eltér egymástól (Cu(II)-cserereakciók és vérszérumban történő disszociációjuk alapján), amit a komplexek különböző szerkezetével (az acetát- és amidcsoportok egymáshoz való helyzete) lehet magyarázni.



1. ábra: A CD2A2AM^{Pip} ligandum szerkezeti képlete

[1] Grobner, T., *Nephrol. Dial. Transplant.* **2006**, 21 (4), 1104; [2] Errante, Y., et al. *Invest. Radiol.* **2014**, 49 (10), 685; Karabulut, N. *Diagn. Interv. Radiol.* **2015**, 21 (4), 269

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), ill. az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjainak a támogatásával készült.

Várhatóan hipoxia-aktivált kétfémes komplexek előállítása és vizsgálata

Nagy Sándor^a, Makai Attila^a, Farkas Etelka^a, Bényei Attila^b, Buglyó Péter^a

^a Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

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

Kutatómunkánk során a hipoxiát és az ebből származó eltérő redukáltságú környezetet, mint az egészséges és daganatos szövetek közötti egyik sarkalatos eltérést próbáljuk meg kiaknázni. A kobalt 2-es és 3-as oxidációs állapotának eltérő kinetikai sajátságai ugyanis lehetővé tehetik, hogy a belőlük képzett komplexek felhasználásával, a gyógyászatban is alkalmazható, szelektív vegyületeket állítsunk elő. Irodalmi adatok alapján a kobalt koordinációs szférájában négy nitrogén és két oxigén donoratomot tartalmazó vegyületek mutatnak biztató eredményeket.^[1]

A hipoxia-aktivált vegyületek fejlesztésének egyik lehetséges stratégiája, amikor egy önmagában is biológiai hatással rendelkező 2O donor mellett egy 4N vagy 2x2N donor ligandumot tartalmazó Co(III) komplexeket állítunk elő. Megelőzőleg már számos ilyen komplexet előállítottak és néhány esetben a szabad ligandumhoz képest megnövekedett biológiai aktivitásukat is igazolták.^[2] Egy alternatív útvonalat képviselhet, ha egy ambidentát ligandum felhasználásával, egy daganat ellenes hatással bíró platinafémet (pl. Pt, Ru) és egy Co(III)-iont tartalmazó kétfémes komplexeket állítunk elő.

Munkánk során így egy új, ambidentát ligandumcsoport szintézisét és azok kétfémes komplexeinek a kialakítását kezdtük meg. Kiindulási vegyületként maltolt választottunk, amelynek egyrészt $[\text{Co}(\text{N},\text{N})_2(\text{O},\text{O})]^{2+}$ típusú komplexeit kutatócsoportunkban már előállítottuk, másrészt a funkcionizálásának kezdeti lépése irodalomból jól ismert módon megvalósítható.^[3] Az előadás keretében az ezen a területen eddig elért eredményeinket tervezzük bemutatni.

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

[2] D. O. Abe, A. Eskandari, K. Suntharalingam, *Dalton Trans.*, **2018**, 47, 13761-13765.

[3] M. A. Santos, R. Grazina et al., **2000**, 78, *J. Inorg. Biochem.* 303-311.

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

Fluorofórt tartalmazó deferasirox-származékok és komplexeik előállítása, valamint vizsgálata

Nagy Imre, Vas Péter Mihály, Farkas Etelka, Buglyó Péter

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

e-mail: nagyimre@science.unideb.hu

A rákos sejtek vasfelvétele nagyobb és környezetük redukтивabb, mint az egészséges sejteké, ez lehetőséget teremthet szelektív tumorellenes szerek kifejlesztésére. A daganatos betegségek gyógyítására használt készítmények ugyanis általában az egészséges sejteket is károsítják. A deferasirox a vasfelhalmozódásos betegek kezelésére széles körben használt (O,N,O) donoratomokat tartalmazó kelátképző.^[1] 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]

Számos, fluorofór csoporttal szubsztituált vegyületet állítottak már elő, mivel alkalmazásuk lehetővé teszi a molekulák sejtben történő követését különböző módszerekkel. Így megállapítható a sejtbe jutás módja és a sejtben történő reverzibilis és irreverzibilis változások vizsgálata is lehetséges. Komplexeik közül például tanulmányozták a Co(III) és Ru(III) tpa-val és fluoreszcens 1,3-diketonokkal alkotott vegyületeit. Azt találták, hogy a diketonok a komplexképződés során elvesztették fluoreszcens tulajdonságukat, azonban a fémionok redukív közegben történt redukciója után a disszociált ligandumok újra fényt emittáltak.^[4]

Munkánk során olyan deferasirox-származékokat állítottunk elő, melyek fluorofórt tartalmaznak. A deferasirox-naftilamid esetén a szabad ligandum és annak Co(III)-mal képzett biszkomplexe esetén is tapasztaltunk fényemissziót. Az 1,10-fenantrolin-5-aminnal képzett származék esetén pedig ambidentát ligandumhoz jutottunk, ami változatos komplexek előállítását teszi lehetővé a továbbiakban.

[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] Anna K. Renfrew, Nicole S. Bryce, Trevor W. Hambley, *Chem. Sci.*, 4, 3731, (2013)

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.

Szalán típusú komplexek szerkezeti analízise kvantumkémiai módszerekkel

Purgel Mihály^a, Balogh Álex Kálmán^a, Fehér Péter Pál^b, Joó Ferenc^{a,c}

^a Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

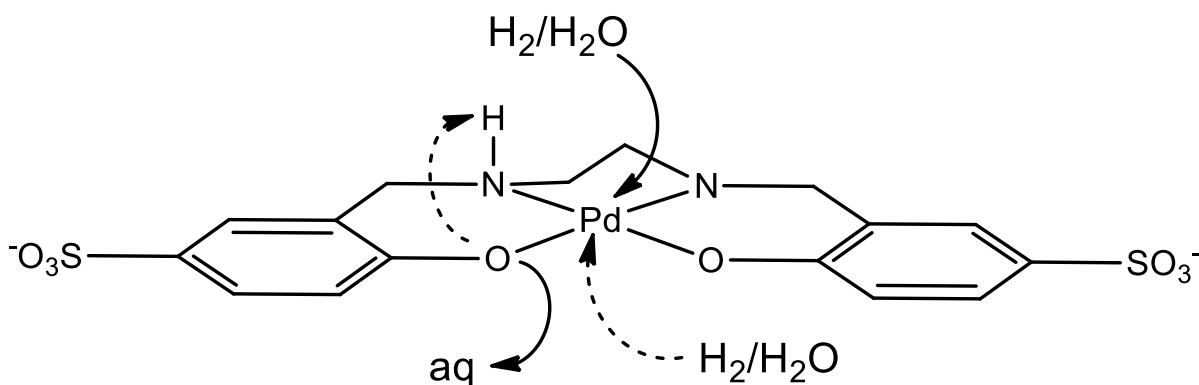
^b MTA Természettudományi Kutatóközpont

^c MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

e-mail: purgel.mihaly@science.unideb.hu

Kvantumkémiai módszerekkel (szemiempirikus modell és sűrűségfüggő elmélet – DFT) vizsgáltuk a palládium(II)ion szalán típusú ligandumokkal képzett komplexeinek térszerkezeteit, valamint azok reakcióját molekuláris hidrogénnel eltérő orientációk esetén. Két fő mechanizmust találtunk: az egyik az ún. direkt mechanizmus, ahol első lépésben a ligandum fenolát karjának hidrogénmolekulával való szubsztitúciója, majd azt követően a koordinált hidrogén deprotonálódása és ezzel egyidejűleg a hidrido-komplex kialakulása valósul meg, míg az ún. indirekt mechanizmus esetén a fenolát kar először egy vízmolekulával (oldószer) cserél, amit a víz–hidrogén szubsztitúció, s végül a deprotonálódás követ.

Az alapvegyület a vízoldható szulfosalán (N,N'-bis(2-hidroxi-4-szulfoniloxibenzil)-etiléndiamin) volt, melynek mind az etilén gerincét, mind a fenolát karját módosítottuk megvizsgálva a komplex flexibilitását és az elektronikus hatásokat egyaránt.



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 valósult meg. Köszönet illeti az NIIF (KIFÜ) által biztosított hozzáférést a magyarországi szuperszámítógép-hálózatához.

Szilolid anionok és dianionok komplexképzési változatai

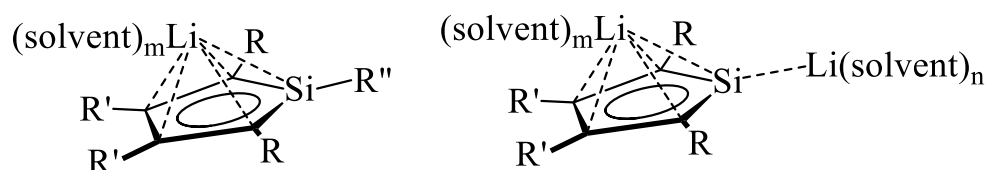
Fekete Csaba^a, Ilona Kovács^a, Tamás Holczbauer^b, Nyulászi László^a

^a BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, és MTA-BME Számításvezérelt Kémiai Kutatócsoport Budapest, 1111, Szt. Gellért tér 4.

^b Kémiai Kristallográfia Kutató Laboratórium, Műszercentrum, MTA TTK - 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

e-mail: malkavie@gmail.com

Aromás vegyületek egyik legjelentősebb képviselője a ciklopentadienil anion, melynek egyik szénatomját szilíciumra cserélve kaphatjuk a szilaciklopentadienil (szilolid) aniont, ami a foszfollal izoelektronos molekula. Ha a szilíciumon lévő másik helyettesítőt is eltávolítjuk, akkor szilolid dianionokhoz juthatunk. Ezek a vegyületek már alkáli ellenionokkal is változatos koordinációs vegyületeket képesek létrehozni. Az előadásban ezeknek a vegyületeknek a változatos koordinációs állapotait szeretnénk bemutatni az oldószer és a gyűrűn található helyettesítőknek függvényében, amihez egykristály röntgen diffrakciós módszer mellett NMR vizsgálatok és DFT számítások is részletesen ismertetjük.



1. ábra: Szilolid anion és dianion szerkezete

Funkcionális aldehid deformiláz enzim modellek előállítása

Kaizer József, Török Patrik, Kripli Balázs, Speier Gábor

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

e-mail: patriktrk6@gmail.com

Kutatómunkám során a természetben fontos szerepet betöltő nemhem-típusú cianobakteriális aldehid deformiláz enzimet modellezem és különböző szubsztrátvegyületekkel vizsgálom az enzimmodell deformilezési reakcióját.

Kiindulásként Fe(II)prekursor komplexeket használok, melyekből *in situ* képezem, H₂O₂ hozzáadásával, a modellként szolgáló kétmagvú Fe(III) peroxo komplexeket. Szubsztrátként fenilacetaldehidet és 2-fenil-propionaldehidet használok. A lejátszódó reakciót UV-Vis spektroszkópiával követem, illetve a katalitikus reakciókat GC-MS technikával vizsgálom. Ezen eredmények segítségével közelebb juthatunk az oxidoreduktáz enzimek működésének megértéséhez.

Köszönetnyilvánítás: A GINOP-2.3.2-15-2016-0049 kutatási pályázat által nyújtott támogatásért.

RhCp* kation kölcsönhatása peptidekkel

Szorcsik Attila^a, Azza Ahmed Hassoon^a, Fülöp Livia^b, Papp Zita Ibolya^b, Gajda Tamás^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai kémiai Tanszék

^b Szegedi Tudományegyetem, Orvosi Vegytani Intézet

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

Az utóbbi évtizedekben jelentősen megnőtt az érdeklődés a Ru(II) és Rh(III) félszendvics szerkezetű (arén = aromás ligandumot tartalmazó) fémorganikus kationok, mint potenciális terápiás szerek iránt, melyek komplexei ígéretes *in vitro* antitumor aktivitást mutatnak. E komplexek hatásmechanizmusa és biospeciációja, kölcsönhatása a biológiai (makro)molekulákkal még nagyrészt ismeretlen. Emellett, ezen fémorganikus kationok és komplexeik oldatkémiai viselkedésével kapcsolatos ismereteink is meglehetősen korlátozottak, ami pedig előfeltétele a fentiek felderítésének. A rendelkezésre álló információk szerint ezen kationok számára a fő kötőhelyek a fehérjékben a His-imidazol- és Cys-tiol csoportok. A potenciónalisán gyógyhatású (Ru/Rh)(arén)(L)X komplexek (ahol X és L két- ill. egyfogú ligandum) monodentát koordinációját fenti oldalláncokhoz kevésbé befolyásolja a His/Cys egységek környezete. Ha azonban lehetőség van kelát koordinációra, alapvető fontosságú a szomszédos donor atomok hatása, és az L ligandumok akár le is cserélődhetnek a fémion koordinációs szférájában.

A (Ru/Rh) félszendvics kationok fehérjékkel való kölcsönhatásának megismerése céljából pH-potenciometriás, UV-VIS és ¹H NMR módszerekkel tanulmányoztuk azok kölcsönhatását számos His származékkal (hisztidin, hisztidin-amid, GGH, GHG, HGG, HHH) valamint a GGA tripeptiddel vizes közegben. A fenti ligandumok mindegyike jelentős Rh(Cp*) affinitással rendelkezik, azonban annak mértéke, a réz(II)-hez hasonlóan, függ a His-alegységek számától és helyzetétől. A meghatározott log*K*_{app} (pH = 7,4) értékek a GGA < GGH < hisztidin ~ hisztidin-amid ~ HGG < HHH sorban egyre nagyobbak. Az Rh(Cp*) kation elősegíti fenti peptidek N-terminális amid-nitrogénjének deprotonálódását is, azonban a deprotonálódás p*K*-ja a szekvenciától jelentősen függ, a p*K*_{NH} értékek a GHG << HGG < GGA < hisztidin-amid < GGH << HHH sorrendben nőnek.

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

Konferencia résztvevői

név	intézmény	e-mail	előadás
Balogh Bettina Diána	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	balogh.bettina@science.unideb.hu	<u>E8</u>
Bashdar Meena Ismael	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	bashdarismael@gmail.com	<u>E19</u>
Bodnár Nikolett	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	bodnar.nikolett@science.unideb.hu	
Buglyó Péter	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	buglyo@science.unideb.hu	E10, E17, E30, E31
Czégéni Csilla Enikő	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	nagy.csilla@science.unideb.hu	<u>E16</u>
Dömötör Orsolya	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	domotor.o@chem.u-szeged.hu	<u>E6</u>
Enyedy Éva Anna	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	enyedy@chem.u-szeged.hu	E6
Farkas Etelka	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	efarkas@science.unideb.hu	E17, E30, E31
Fábián István	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ifabian@science.unideb.hu	E12, E18
Fekete Csaba	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék	malkavie@gmail.com	<u>E33</u>
Földi-Bíró Linda	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	linda.biro@science.unideb.hu	
Gajda Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tamas.gajda@chem.u-szeged.hu	E35
Garda Zoltán	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	garda.zoltan@science.unideb.hu	E1, <u>E29</u>
Gál Gyula Tamás	MTA Természettudományi Kutatóközpont	gal.tamas@ttk.mta.hu	<u>E9</u>
Gyurcsik Béla	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	gyurcsik@chem.u-szeged.hu	E5, <u>E25</u>
Hajdu Bálint	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	balinth11@chem.u-szeged.hu	<u>E5</u> , E25
Horváth Henrietta	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	henrietta.horvath@science.unideb.hu	E16, <u>E22</u>

53. Komplexkémiai Kollokvium

név	intézmény	e-mail	előadás
Jakusch Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jakusch@chem.u-szeged.hu	<u>E4</u>
Jancsó Attila	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	jancso@chem.u-szeged.hu	
Janóné Dr. Ungor Ditta Anita	Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék	ungord@chem.u-szeged.hu	
Joó Ferenc	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	joo.ferenc@science.unideb.hu	E16, E21, E22, E32
Jorge Lado Sanjurjo	Szegedi Tudományegyetem; Centro de investigaciones Científicas Avanzadas (CICA), Universidade da Coruna, Spain	jorge.lado.s@chem.u-szeged.hu	<u>E20</u>
Juhász Ádám	Szegedi Tudományegyetem, ÁOK Orvosi Vegytani Intézet	juhaszadam79@gmail.com	
Juhászné Csapó Edit	Szegedi Tudományegyetem, ÁOK Orvosi Vegytani Intézet	juhaszne.csapo.edit@med.u-szeged.hu	
Kaizer József	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	kaizer@almos.vein.hu	E14, E19, E34
Kathó Ágnes	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	katho.agnes@science.unideb.hu	E22
Kállay Csilla	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kallay.csilla@science.unideb.hu	E11
Kálmán Ferenc Krisztián	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	kalman.ferenc@science.unideb.hu	<u>E1</u> , E2, E29
Katona József	Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék	j.soldier.93@gmail.com	
Kiss Tamás	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	tkiss@chem.u-szeged.hu	E4
Kollár László	Pécsi Tudományegyetem, Szervetlen Kémiai Tanszék	kollar@gamma.ttk.pte.hu	<u>E23</u>
Kozsup Máté	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	kozsup.mate@science.unideb.hu	<u>E17</u>
Kripli Balázs	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	balazskripli@gmail.com	<u>E14</u> , E19, E34
Lente Gábor	Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék	lente@gamma.ttk.pte.hu	

név	intézmény	e-mail	előadás
Lihi Norbert	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	lihi.norbert@science.unideb.hu	<u>E12</u>
Lukács Márton	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	lukacs.marton@science.unideb.hu	E8, <u>E11</u>
Major Máté Miklós	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	miklos.mate.major@gmail.com	<u>E15</u>
Mészáros János Péter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	meszaros.janos@chem.u-szeged.hu	
Nagy Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	nagyimre@science.unideb.hu	<u>E31</u>
Nagy Sándor	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	nagy.sandor@science.unideb.hu	<u>E30</u>
Nyulászi László	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék	nyulaszi@mail.bme.hu	E33
Orbán Eszter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	eszterorban94@gmail.com	<u>E27</u>
Ozsváth András	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ozsvath.andras@science.unideb.hu	<u>E10</u>
Ősz Katalin	Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék	oszk@gamma.ttk.pte.hu	
Papp Gábor	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	papp.gabor@science.unideb.hu	<u>E21</u> , E22
Pápai Imre	MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet	papai.imre@ttk.mta.hu	<u>E24</u>
Purgel Mihály	Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék	purgel.mihaly@science.unideb.hu	<u>E32</u>
Simon Fruzsina	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	simon.fruzsina@science.unideb.hu	<u>E18</u>
Sipos Pál	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	sipos@chem.u-szeged.hu	E20, E27, E28
Skodáné Földes Rita	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	skodane@almos.uni-pannon.hu	<u>E26</u>
Szabó Mária	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szabo.maria@science.unideb.hu	E18

53. Komplexkémiai Kollokvium

név	intézmény	e-mail	előadás
Szakács Bence	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szakacs.bence28@gmail.com	<u>E7</u>
Szekeres Levente István	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	slevente@chem.u-szeged.hu	
Székely Enikő	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szekely.eniko@science.unideb.hu	
Szorcsik Attila	MTA-SZTE Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoport	szorcsik@chem.u-szeged.hu	<u>E35</u>
Szunyog Györgyi	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	szunyog.gyorgyi@science.unideb.hu	E11, <u>E13</u>
Tircsó Gyula	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	gyula.tircso@science.unideb.hu	E1, E2, E3, E29
Tóth Imre	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	imre.toth@science.unideb.hu	E3, E29
Tóth-Molnár Enikő	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	molnar.eniko@science.unideb.hu	E1, <u>E2</u>
Török Patrik	Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék	patriktrk6@gmail.com	<u>E34</u>
Váradi Balázs	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varadiiii@gmail.com	E1, <u>E3</u> , E29
Várnagy Katalin	Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	varnagy.katalin@science.unideb.hu	E7, E8, E11, E12, E13
Ziegenheim Szilveszter	Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék	ziegenheimsz@chem.u-szeged.hu	<u>E28</u>