



LIFE FROM INSIDE

48. Komplexkémi Kollokvium

**Az MKE Komplexkémi Szakcsoprtjának és
az MTA Koordinációs Kémi Munkabizottságának
a rendezvénye**

2014. május 28-30., Siófok

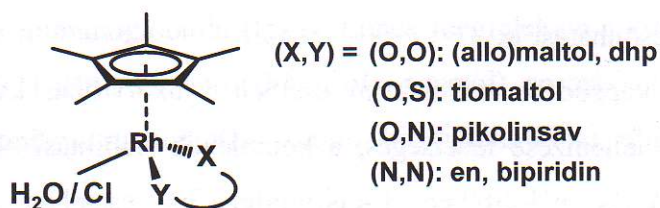
Rh(III)(η^5 -Cp^{*}) kétfogú N/O/S-donor ligandumokkal képzett komplexeinek oldategyensúlyi jellemzése és kölcsönhatásuk albuminnal

Dömötör Orsolya, Kiss Gabriella, Mészáros János Péter, Enyedy Éva Anna

Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

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

Az utóbbi években a rákellenes fémkomplexek iránti érdeklődés egyértelmű eltolódást mutat a platina komplexektől különböző hatásmechanizmusú vegyületek felé. A legelőrehaladottabb, már klinikai tesztelés alatt álló komplexek a Ru(III) központi fémiont tartalmazó NAMI-A és KP1339. Ugyanakkor valószínűsíthető, hogy az aktivitásért a redukált forma felelős, ezért intenzív kutatások folynak félszendvics típusú Ru(II)-arén komplexekkel is. Az Os(II)-, Rh(III)- és Ir(III)-komplexek izoelektronos szerkezetűek a Ru(II)-komplexekkel. Az ilyen komplexek iránti érdeklődés eddigi hiánya főként inertségüknek tudható be. Egy η^6 -arén vagy η^5 -arenil csoport bevezetésével viszont nagyságrendekkel növelhető a komplexek ligandumcsere sebessége [1].



Munkánk során Rh(III)(η^5 -Cp^{*}) (Cp^{*} = pentametil-ciklopentadién) kétfogú ligandumokkal alkotott komplexeinek (lásd ábra) oldategyensúlyi viselkedését vizsgáltuk pH-potenciometria, UV-látható spektrofotometria és ¹H NMR spektroszkópia segítségével. A fémionhoz képes koordinálódni a kloridion is, ezért kísérleteinket kloridos és kloridmentes közegben is elvégeztük. Vizsgáltuk továbbá a stabilitásuk alapján kiválasztott Rh(III)(η^5 -Cp^{*}) komplexek humán szérum albuminnal való kölcsönhatását fiziológiás pH-n ultraszűrés, kapilláris elektroforézis, NMR és fluorimetriás módszerekkel, ill. az albuminon való kötődés alaposabb feltárásához N- és S-donor modellvegyületekkel való kísérleteket is végeztünk.

[1] Y. Geldmacher, M. Oleszak, W.S. Sheldrick, *Inorg. Chim. Acta*, **2012**, 393 84–102.

Köszönetnyilvánítás: OTKA 103905; a kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

12.00 – 14.00 Ebéd

Elnök: Várnagy Katalin

- 14.00 – 14.20 Árus Dávid, Roland Krämer, Helga Szelke (SzTE; Universität Heidelberg): **Torma peroxidáz-tetrametil-benzidin- H_2O_2 tesztreakció alkalmazása heparin meghatározására**
- 14.20 – 14.40 Benkő Zoltán, Dominikus Heift, Hansjörg Grützmaier (BME; ETH Zürich): **A foszfaet inolát ion mint építőegység komplexekben**
- 14.40 – 15.00 Németh Eszter, Schilli Gabriella Krisztina, Milan Kozisek, Kyosuke Nagata, Gyurcsik Béla (SzTE; Gilead Sciences and IOCB Research Center; University of Tsukuba): **Az NColE7 metallonukleáz átalakítása szabályozott mesterséges enzimmé**
- 15.00 – 15.20 Zóka István Győző, Czene Anikó, Jancsó Attila, Gyurcsik Béla (SzTE; SzTE-MTA): **N-terminális végen rövidített colicin E7 mutáns kémiai reaktiválás**
- 15.20 – 15.40 Póta Kristóf, Garda Zoltán, Kálmán Ferenc Krisztián, Tircsó Gyula (DE): **A $[Mn(phdta)]^{2-}$ -komplex egyensúlyi, relaxációs és kinetikai tulajdonságainak vizsgálata**
- 15.40 – 16.00 Nagy Viktória, Garda Zoltán, Mezei Roland, Carlos Platas-Iglesias, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE; Universidade da Coruña): **Transz-DO2A származék ligandumok előállítása és Mn^{2+} -komplexeik egyensúlyi és kinetikai jellemzése**

16.00 – 16.20 Kávészünet

Elnök: Speier Gábor

- 16.20 – 16.40 Molnár Enikő, Nathalie Camus, Véronique Patinec, Gabriele A. Rolla, Mauro Botta, Kálmán Ferenc Krisztián, Fodor Tamás, Raphaël Tripier, Carlos Platas-Iglesias, Tircsó Gyula (DE; Université de Bretagne Occidentale; Università del Piemonte Orientale “Amedeo Avogadro”; Universidade da Coruña): **Pikolinátcsoportot tartalmazó makrociklusos ligandumok $Mn(II)$ -komplexei: egyensúly és kinetika**
- 16.40 – 17.00 Garda Zoltán, Ruscsák Erika, Aurora Rodríguez Rodríguez, Carlos Platas-Iglesias, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE; Universidade da Coruña): **Oldalláncban pikolinátcsoportot tartalmazó makrociklusos ligandumok Gd^{3+} -, Mn^{2+} - és Cu^{2+} -komplexeinek vizsgálata**
- 17.00 – 17.20 Vágner Adrienn, Bodnár Judit, Mauro Botta, Giovanni B. Giovenzana, Lorenzo Tei, Tóth Imre, Baranyai Zsolt (DE; Università degli Studi del Piemonte Orientale “A. Avogadro”): **A $Gd(OBETA)^-$ és $Gd(EGTA)^-$ komplexek disszociációs reakciói fiziológiához közeli feltételek mellett**
- 17.20 – 17.40 Matyuska Ferenc, Dokonpil Vanessza, Gajda Tamás (SzTE): **TREN-alapú tripodális ligandumok komplexképző sajátságainak összehasonlítása**

05.28. szerda

05.28. szerda

05.28. szerda

05.28. szerda

05.28. szerda

05.28. szerda

05.28. szerda

48. Komplexkémiái Kollokvium

05.28. szerda

- 17.40 – 18.00 Szorcsik Attila, Matyuska Ferenc, Dancs Ágnes, Gajda Tamás (MTA-SzTE; SzTE):
TACH alapú tripodális polidentát ligandumok réz(II) és cink(II) komplexei
- 18.00 – 18.30 Valicsek Zsolt, Horváth Ottó (PE): **Különböző típusú porfirin-komplexek képződése**

18.30 – 20.00 *Vacsora*

05.28. szerda

Elnök: Nyulászi László

- 20.00 – 20.20 Bajnóczi Éva, Peintler Gábor, Pálinkó István, Sipos Pál (SzTE): **A króm(III)-tetrahidroxó komplex instabilitása erősen lúgos közegben**
- 20.20 – 20.40 Farkas Edit, Tircsó Gyula, Kálmán Ferenc Krisztián, Tóth Imre (DE): **Al(III)-vegyeskomplexek egyensúlyi és szerkezeti vizsgálata**
- 20.40 – 21.00 Ősz Katalin, Lente Gábor, Fábíán István (DE): **Fotokémiai reakciók diódasoros spektrofotométerben - a látszat néha csal**

05.28. szerda

05.28. szerda

05.28. szerda

05.28. szerda

05.28. szerda

7.00 – 8.30 Reggeli

Elnök: Joó Ferenc

- 8.30 – 8.50 Bihari Zsolt, Nagy Zoltán, Buglyó Péter (DE): **Félszendvics szerkezetű $[\text{Ru}(\eta^6\text{-p-cimol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ kölcsönhatása több hisztidint tartalmazó oligopeptidekkel**
- 8.50 – 9.10 Laskay Krisztina, Jakusch Tamás (SzTE): **L-cisztein $[(\eta^6\text{-p-cimol})\text{Ru(II)}]$ komplexeinek oldategyensúlyi folyamatai**
- 9.10 – 9.30 Dömötör Orsolya, Kiss Gabriella, Mészáros János Péter, Enyedy Éva Anna (SzTE): **$\text{Rh(III)}(\eta^5\text{-Cp}^*)$ kétfogú N/O/S-donor ligandumokkal képzett komplexeinek oldategyensúlyi jellemzése és kölcsönhatásuk albuminnal**
- 9.30 – 9.50 Grenács Ágnes, Sóvágó Imre (DE): **Az amiloid- β peptid N-terminális fragmenseinek és mutánsainak kölcsönhatása Cu(II) -, Ni(II) - és Zn(II) -ionokkal**
- 9.50 – 10.10 Csipak Brigitta, Agnieszka Belczyk, Masamitsu Asaka, Kyosuke Nagata, Gyurcsik Béla, Wojciech Bal (SzTE; Polish Academy of Sciences; University of Tsukuba; MTA-SzTE): **Cinkujj fehérjék reakciója Ni^{2+} -ionokkal – egy lehetőség mesterséges nukleázok kialakítására**
- 10.10 – 10.30 Farkas Gergely, Császár Zsófia, Bényei Attila, Lendvay György, Tóth Imre, Bakos József (PE; DE; MTA TTK): **Komplexbővítés dinamikus kinetikai rezolválással: királis aminoalkil-foszfinok alkalmazása enantioszelektív reakciókban**

10.30 – 10.50 Kávészünet

Elnök: Sóvágó Imre

- 10.50 – 11.10 Szalontai Gábor, Párkányi László, Szabó Pál, Drahos László, Besenyi Gábor (PE; MTA TTK): **Difenil-foszfino oldalsóportot hordozó Ar-BIAN-ligandum előállítása és reakciói**
- 11.10 – 11.30 Szalontai Gábor, Jasmina Sabolović, Marijana Marković, Balogh Szabolcs (PE; Institute for Medical Research and Occupational Health): **Paramágneses bisz(valin) Cu(II) komplexek térszerkezeteinek jellemzése szilárd fázisú ^2H és ^{13}C MAS NMR spektroszkópiával**
- 11.30 – 11.50 Molnár Milán, Kaizer József, Lakk-Bogáth Dóra, Speier Gábor (PE): **Réz-aminosav komplexek előállítása és vizsgálata**
- 11.50 – 12.10 Krámos Balázs, Oláh Julianna (BME; MTA TTK): **Többállapotú reakciókészség a humán aromázáz enzimben**
- 12.10 – 12.30 Czégény Csilla Enikő, Kovács Henrietta, Joó Ferenc (MTA-DE; DE): **Hidrodehalogénezés anioncserélőre rögzített palládium katalizátorokkal**

12.30 – 14.00 Ebéd

05.29. csütörtök

05.29. csütörtök

05.29. csütörtök

05.29. csütörtök

05.29. csütörtök

05.29. csütörtök

05.29.

Koordinációs Kémiai Munkabizottság ülése. Elnök: Farkas Etelka

- 05.29. csütörtök
- 14.00 – 14.15 Szigyártó Imola Csilla: **In memoriam Simándi László**
- 14.15 – 14.55 Alessandro Maiocchi, Chiara Brioschi, Claudia Cabella, Luigi Miragoli, Simona Ghiani (Bracco Imaging spa): **CE-MRI beyond perfusion: on the route towards molecular**
- 14.55 – 15.15 Zsolt Baranyai, Ernő Brücher, Alessandro Maiocchi, Fulvio Uggeri, Imre Tóth, Silvio Aime (DE; Bracco Imaging spa; University of Torino): **Chemical Research on Metal-Aminopolycarboxylate Complexes used in Theragnostics**
- 15.15 – 15.45 Attila Pallagi, Attila Gácsi, Éva Bajnóczi, Bence Kutus, Ágost Tasi, Gábor Peintler, Ottó Berkesi, István Pálílinkó, Pál Sipos (SzTE): **Ca(II) complexation in hyperalkaline aqueous solutions – relevance in the Bayer process and in the safety of radioactive waste repositories**
- 15.45 – 16.45 Buglyó Péter (DE): **Potenciálisan biológailag aktív platinafémm komplexek: szintézis, egyensúly, biotranszformáció**
- 16.45 – 17.10 *Kávészünet*

Elnök: Kiss Tamás

- 05.29. csütörtök
- 17.10 – 17.50 Rockenbauer Antal (MTA-BME): **ESR komplexkémiái kutatások a KKKI-ban és utódszervezeteiben a 2014-es felszámolásig**
- 17.50 – 18.10 Bajnóczi Éva, Bálint Szabolcs, Berkesi Ottó, Körtvélyesi Tamás, Kuzman Ernő, Lengyel Attila, Pálílinkó István, Peintler Gábor, Ingmar Persson, Sipos Pál (SzTE; MTA TTK; ELTE; Swedish University of Agricultural Sciences): **Sn(II) ionok speciációja erősen lúgos közegben**
- 18.10 – 18.30 Fodor Tamás, Garda Zoltán, Rozinka Felícia, Kálmán Ferenc Krisztián, Kovács Zoltán, Tircsó Gyula, Tóth Imre (DE; University of Texas Southwestern Medical Center): **Vegyesligandumú tallium(III)-komplexek egyensúlyi és kinetikai vizsgálata**
- 18.30 – 18.50 Gácsi Attila, Béltéki Rita, Cseh Attila, Pallagi Attila, Peintler Gábor, Pálílinkó István, Sipos Pál (SzTE): **A NaOH/NaAl(OH)₄/Ca(OH)₂ elegyekben képződő CaAl(OH)₄⁺(aq) ionpár stabilitási állandója és az oldatokból kiváló szilárd fázisok jellemzése**
- 18.50 – 19.10 Udvardy Antal, Szarvas Tímea, Bényei Attila Csaba, Joó Ferenc, Kathó Ágnes (DE; MTA-DE): **Vízoldható foszfóniumsók és Ag(I)-ionok kölcsönhatása révén kialakuló önszerveződő rendszerek**
- 19.10 – *Vacsora*

7.00 – 8.30 Reggeli

Elnök: Gajda Tamás

- 8.30 – 8.50 Raics Mária, Kállay Csilla, Várnagy Katalin, Sóvágó Imre (DE; MTA-DE): **Aszparaginsavat és hisztidint egyaránt tartalmazó hexapeptidek átmenetifém-komplexei**
- 8.50 – 9.10 Kállay Csilla, Csire Gizella, Nagy Lajos, Várnagy Katalin, Sóvágó Imre (MTA-DE; DE): **Hisztidint és metionint tartalmazó peptidek kölcsönhatása réz(II)ionokkal**
- 9.10 – 9.30 Lihi Norbert, Várnagy Katalin (DE): **Potenciális vas-kelátorok oldategyensúlyi, szerkezeti és redoxi sajátosságainak vizsgálata**
- 9.30 – 9.50 Csonka Róbert, Kaizer József, Lakk-Bogáth Dóra, Speier Gábor (PE): **Nem hem vastartalmú enzimmodellek előállítása és vizsgálata**
- 9.50 – 10.10 Lakk-Bogáth Dóra, Kaizer József, Speier Gábor (PE): **Nemhem-vastartalmú modellek előállítása és gyakorlati alkalmazásai: 1-amino-ciklopropán-1-karbonsav oxidáz (ACCO)**
- 10.10 – 10.30 Szávuly Miklós István, Nagy Emőke, Kaizer József, Speier Gábor (PE): **Nem-hem divasat tartalmazó funkcionális enzimmodellek**

10.30 – 10.50 Kávészünet

Elnök: Tóth Imre

- 10.50 – 11.10 Bolyog-Nagy Evelin, Udvardy Antal, Joó Ferenc, Kathó Ágnes (DE; MTA-DE): **Nitrilek szelektív hidratálása amidokká foszfaurotropint tartalmazó Ru(II)-komplexekkel vizes közegben**
- 11.10 – 11.30 Horváth Henrietta, Papp Gábor, Adrián Mena-Cruz, Laurenczy Gábor, Joó Ferenc (MTA-DE; DE; EPFL): **Katalitikus C-H aktiválás Ru(II)-foszfin komplexekkel**
- 11.30 – 11.50 Papp Gábor, Horváth Henrietta, Purgel Mihály, Joó Ferenc (MTA-DE; DE): **Szén-dioxid aktiválás**
- 11.50 – 12.10 Kutus Bence, Peintler Gábor, Pallagi Attila, Czeglédi Eszter, Pálínkó István, Sipos Pál (SzTE): **Kalcium-heptaglukonát komplexek jellemzése semleges és erősen lúgos kémhatású oldatokban**
- 12.10 – 12.30 Pallagi Attila, Peintler Gábor, Gácsi Attila, Kutus Bence, Pálínkó István, Sipos Pál (SzTE): **Az oldott Ca(OH)₂ jelentősége erősen lúgos oldatokban**
- 12.30 – 12.50 Tasi Ágost Gyula, Pallagi Attila, Peintler Gábor, Pálínkó István, Sipos Pál (SzTE): **Aluminát és glukonát közötti kondenzációs komplexképződési reakció Bayer-típusú oldatokban**

12.50 – Ebéd

05.30. péntek

05.30. péntek

05.30. péntek

05.30. péntek

05.30. péntek

05.30. péntek

05.30. péntek