

52. Komplexkémiái Kollokvium

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

2018. május 22-24., Balatonvilágos

12.00 – 14.00 Ebéd

Elnök: Várnagy Katalin (DE)

14.00 – 14.10 Megnyitó

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

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

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

15.10 – 15.30 **E4** Nagy Sándor, Farkas Etelka, Bényei Attila Csaba, Buglyó Péter (DE): **[Co^{III}(NN)(NN)(OO)]²⁺ összetételű komplexek előállítása és analitikai jellemzése**

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

15.50 – 16.20 Kávészünet

Elnök: Dömötör Orsolya (SzTE)

16.20 – 16.40 **E6** Csupász Tibor, Váradi Balázs, Garda Zoltán, Baranyai Zsolt, Ghiani Simona, Maiocchi Alessandro, Tóth Imre, Tircsó Gyula (DE): **Nyíltláncú ligandumokkal képzett Mn²⁺-komplexek előállítása és koordinációs kémiai jellemzése**

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

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

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

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

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

18.30 – Vacsora

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

05.22. kedd

Kismolekulák és fehérjék kölcsönhatása DNS-sel fémionok jelenlétében

Hajdu Bálint^a, Kiricsi M.^b, Moncol J.^c, Gyurcsik B.^{a}*

^a Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

^b Szegedi Tudományegyetem, Biokémiai és Molekuláris Biológiai Tanszék

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

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

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

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

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



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