

Az „Alkalmazott koordinációs kémia” margójára

Beck Mihály professzor úr, akadémikus tudományos munkásságát röviden, tömören foglalja össze a Debreceni Egyetem honlapján 2017. augusztus 18-án megjelent méltatás előző oldalán idézett részlete, de bármilyen más, az életét, tudományos munkáját bemutató leírás, életrajz [1] kiemeli, hogy rendkívül fontos szerepet játszott a hazai komplexkémiai kutatások fejlődésében, a komplex vegyületek kémiájának nemzetközi hírű szakértője volt. A Magyar Kémikusok Lapjában 1972-ben megjelent „Alkalmazott koordinációs kémia” cikk az addigi eredmények összefoglalásával már előrevetítette, hogy a koordinációs kémiai folyamatok, a komplex vegyületek az élet minden területén jelen vannak, a komplexkémiai folyamatok termodinamikájának, kinetikájának és redoxi tulajdonságainak, valamint a komplexvegyületek szerkezetének megismerése az élő és élettelen természeti jelenségek megértéséhez nélkülözhetetlen, alkalmazásuk az iparban, az orvostudományban, a gyógyászatban újabb és újabb komplexvegyületek szintézisét és mélyreható vizsgálatait igényli.

A cikk megjelenése óta eltelt 50 év alatt végzett komplexkémiai vizsgálatok révén sokszorosára növekedett azon komplexvegyületek száma, amelyekre termodinamikai adatokat határoztak meg. A szintetikus módszerek fejlődése, az automata peptidszintetizáló berendezések elterjedése, egyéb, a különböző ligandumok kinyerésére alkalmazott technikák kifejlesztése egyre nagyobb számú és molekulatömegű komplexképző ligandum előállítását tette és teszi lehetővé. Ezzel párhuzamosan az egyensúlyi vizsgáló módszerek nagy léptékű fejlesztése, automatizálása, új módszerek alkalmazása a stabilitási állandók meghatározására, a számítástechnika fejlődése, ezzel az adatfeldolgozás nagyságrendekkel gyorsabb megvalósítása egyre nagyobb számú és egyre összetettebb komplexképződési folyamat jellemzését tette lehetővé.

Így óriási adatmennyiség gyűlt össze, ami a komplexekre meghatározott stabilitási állandókat és egyéb termodinamikai paramétereket jelenti. A korábbi nyomtatott formát felváltotta az elektronikus formában összegyűjtött adatbázis, amely az 1877 és 2002 között megjelent adatokat tartalmazza. A program segítségével 105 500 oldalon, 22 000 publikációból gyűjtött mintegy 9000 ligandumra vonatkozó adat között lehet keresgélni. [2] Bár a kutatómunkában igen nagy segítséget jelent az adatbázis, ugyanakkor az új, mintegy 20 évre visszanyúló adatokat már nem tartalmazza, és a naprakész frissítése szinte lehetetlennek látszik. Ezen egy olyanfajta adatbázis létrehozása segíthetne, amelynek feltöltése a közlésekkel párhuzamosan elvárt feladat lenne, hasonlóan a röntgenkristallográfiával meghatározott molekulászerkezetek adatbázisához.

A koordinációs kémia töretlen fejlődését tükrözi, hogy a tudományterület legrangosabb nemzetközi rendezvénye az „International Conference on Coordination Chemistry” 2018-ban tartotta meg a 43. konferenciáját. A két évente megrendezett konferencia más-más földrészekben, jellemzően 1200–1300 résztvevővel zajlik. Az előadásokat 5–7 párhuzamos szekcióban hallgathatják meg a résztvevők, a koordinációs kémiához kapcsolódó legkülönbözőbb területeken született eredményeket mutatják be a kutatók több száz előadásban és poszteren. 2016-ban a 42. konferenciát Brestben (Franciaország), 2018-ban a 43. konferenciát Sendaiban (Japán) tartották, míg a 44. konferenciát 2022-re halasztották, és Riminiben (Olaszország) szervezik. Azt, hogy milyen sokféle kapcsolódási pontja, alkalmazása van a koordinációs kémiának, jól szemlélteti a Brestben tartott konferencia témaköreiből való vá-

logatás: koordinációs vegyületek szintézise, jellemzése, tulajdonságai; molekuláris mágnesség; fotoindukált jelenségek; királistás; vezetőképesség; fémorganikus vegyületek, fémorganikus katalizátorok; multifunkcionális anyagok; kismolekulák aktiválása; energiaátalakítás; szupramolekuláris kémia; diagnosztika, képalkotás, terápia; fémionok a biológiában; zöld kémia; nanotudományok; molekuláris elektronika; elméleti koordinációs kémia.

A nagy elődök (Beck Mihály, Burger Kálmán, Kőrös Endre, Gergely Arthur) nyomdokaiba lépve a magyarországi komplexkémiai kutatások jelenleg is több egyetemi és kutatóintézeti műhelyben nemzetközileg is elismert magas szinten folynak. Jelenleg két nagy koordinációs kémiai iskola működik, a Debreceni Egyetemen (DE) és a Szegedi Tudományegyetemen (SZTE), de a komplexkémiai (is) kapcsolatos kutatások folynak az ELTE, a Pannon Egyetem (PE), a Pécsi Tudományegyetem (PTE), a BME és a most átalakult Eötvös Loránd Kutatási Hálózat (ELKH) műhelyeiben is. A komplexkémiai kutatások eredményeiről Magyarországon is rendszeresen, hazai konferenciasorozaton, a Komplexkémiai Kollokviumon számolnak be a kutatók. A Komplexkémiai Kollokviumot a cikk is említi, és erről a rendezvényről külön is szólni kell.

A cikkből kiderül, hogy az 1972-ben sorra kerülő VII. Komplexkémiai Kollokvium tárgya is a komplexkémia gyakorlati és ipari alkalmazásai volt. A Komplexkémiai Kollokvium a koordinációs kémia területén a legfontosabb hazai rendezvény volt, és mind a mai napig fontos színtere a legújabb hazai koordinációs kémiai kutatási eredmények bemutatásának. Az első Komplexkémiai Kollokviumot Balatonszéplakon rendezték 1963-ban, ennek létrehozásában is kulcsszerepet játszott Beck Mihály, aki Burger Kálmánnal és Kőrös Endrével, a már kialakult vagy éppen szerveződő komplexkémiai iskolák vezető kutatóival együtt szervezte meg a konferenciát. Ezzel olyan konferenciasorozatot hívtak életre, amely a Magyar Kémikusok Egyesülete Komplexkémiai Szakcsoportjának és az MTA Koordinációs Kémiai Munkabizottságának rendszeres szimpóziuma lett. Az első időszakban két évente, majd 1970-től, az V. Komplexkémiai Kollokviumtól kezdve évente került sor a konferenciára, általában más-más városban. Az 50. Komplexkémiai Kollokviumot 2016 májusában Balatonvilágoson tartottuk meg [3], idén pedig az 54. konferenciára került sor, sajnos a hagyományoktól eltérően nem személyes részvétellel, hanem online térben (280. oldal). A konferenciákon a résztvevők száma 50–100 között mozgott, és a két-három nap alatt általában 30–50 előadás hangzott el. Ez a konferencia nagyon jó lehetőség a kutatások kezdetén levő fiatalok bemutatkozására, eredményeik ismertetésére, a tapasztaltabb kutatók kutatásainak összefoglaló előadásaira, egy-egy kutatási téma köré szervezett „miniszimpóziumra”. A konferencia-előadások lefedik a magyarországi komplexkémiai kutatási területeket, így a legfrissebb konferenciakiadványainkban szereplő összefoglalók képet adnak arról, hogy a hazai műhelyekben milyen széles körűek az alkalmazott koordinációs kémiai kutatások.

Az **orvostudomány, a gyógyászat** ma már elképzelhetetlen a komplexvegyületek alkalmazása nélkül. Komplexképződési folyamatok ismerete szükséges a biológiai rendszerekben zajló élet-tani folyamatok megértéséhez, bizonyos betegségek kialakulási okai feltárásához és így a betegségek kezeléséhez, nehézfémmerge-kezeléséhez, fémiontartalmú diagnosztikai és terápiás készítmények, gyógyszerek kifejlesztéséhez.



A DE Kémiai épületében elhelyezett emléktábla

A PE kutatócsoportjában folyó kutatások a vas-, mangán- és réztartalmú oxigenáz enzimek, illetve a reaktív gyökök elbontását biztosító kataláz enzimek modellezésére és elsősorban a vizes közegben lejátszódó folyamatok jellemzésére irányulnak.

A DE és az SZTE kutatócsoportjaiban a fehérjék és a fémionok közötti komplexképződési folyamatok egyensúlyi, kinetikai és redoxi szempontból történő jellemzése történik. Ennek célja egyrészt a biológiai rendszerekben metalloenzimek, metalloproteinek (SOD-enzimek, foszfatázok, oxidázok, nukleázok) közreműködésével zajló folyamatok modellezése, a metalloenzimek, metalloproteinek működésének, szerepének a leírása, mesterséges enzimek létrehozása, a káros oxidatív gyökök keletkezésének, hatásának és semlegesítésének a megértése.

Ugyancsak a peptidek, fehérjék komplexképződési folyamataihoz szorosan kapcsolódnak azok a kutatások, amelyekben a neurodegeneratív betegségek folyamataiban a fémionok, illetve a fehérjékkel létrehozott komplexeik szerepének a feltárása, és így a potenciálisan toxikus fémionok eltávolítására alkalmas kelátrok kifejlesztése a cél.

A peptideknek, mint kelátoroknak, fontos szerepe lehet a mérgező fémionok eltávolításában, nehézfémion-szennyezések kimutatásában; ezek tervezése, kifejlesztése a megfelelő molekulák és fémionok komplexképződési és/vagy redoxi folyamatainak szisztematikai vizsgálatát igényli.

Közismert, hogy a platinakomplexek jelentik a leghatékonyabb daganatellenes szerek egyik csoportját. A platinafémek csoportjába tartozó további fémionok (Ru, Rh, Os, Ir) komplexeinek szintézise, egyensúlyi és szerkezeti jellemzése, hazai és nemzetközi együttműködésben végzett biológiai vizsgálatokkal kiegészítve, új daganatellenes terápiás szerek kifejlesztését teszi lehetővé. Ilyen irányú kutatások a DE és az SZTE kutatócsoportjában folynak.

Széles körű kutatások folynak a DE kutatócsoportjában gadolínium-, vas- és mangánionokat tartalmazó MRI-kontrasztanya-

gok és egyéb képalkotó módszereknél alkalmazható komplexek kifejlesztésében és alkalmazhatóságának vizsgálatában. A kutatások sikerességét jól tükrözi számos szabadalom és több olyan készítmény kifejlesztésében való részvétel, amelyet ma már az orvosi gyakorlatban is használnak.

A komplexek **ipari alkalmazási** lehetőségei is szerteágazóak. Elsősorban a fémkomplexeknek mint homogén katalizátoroknak az alkalmazása jelentős, amelyek révén szerves vegyületek szelektív hidrogénezésére, illetve oxidációjára nyílik lehetőség. Az ily módon működő katalizátorok elősegítik a környezetbarát technológiák alkalmazását az iparban. Emellett a különböző gyártási folyamatok során keletkező komplexek jellemzőinek meghatározása az ipari folyamatnak megfelelő körülmények között nagyban hozzájárulhat az alkalmazott technológia továbbfejlesztéséhez, korszerűsítéséhez, gazdaságos és környezetbarát technológiák létrehozásához.

A DE kutatócsoportjában több évtizede foglalkoznak olyan vizes közegű homogén katalizátorok és katalitikus rendszerek fejlesztésével, amelyek elsősorban a hidrogénezésben, a hidrogéntárolásban és kis molekulák aktiválásában alkalmazhatóak. A platina- és nemesfém- (Ru, Rh, Ir, Au) komplexek mellett a jóval gazdaságosabb és környezetbarát biogén fémeket (Fe, Cu, Co, Ni, Mn) tartalmazó komplexek kifejlesztése a cél. Ugyancsak a szerves vegyületek szintézisének, illetve egyéb szelektív reakciójának (pl. oxidációjának) katalizálására lehetnek alkalmasak a vas- vagy platinafém-tartalmú katalizátorok, amelyek kifejlesztésén a PE és a PTE kutatói dolgoznak.

A SZTE-n folyó változatos komplexkémiai kutatási irányok egyike közvetlenül az alumíniumgyártás ipari folyamatához kapcsolódik, az alumínium előállításának folyamatában szerepet játszó, a folyamat során alkalmazott rendkívül erősen lúgos közegben létrejövő alumínium- és kalciumkomplexek keletkezésének, összetételének meghatározása révén.

A felsorolt koordinációs kémiai kutatások természetesen nem nélkülözhetik azokat az irányokat, amelyek szerkezetvizsgáló módszerek alkalmazásával, illetve elméleti számításokkal hozzájárulnak a komplexek feltételezett szerkezetének meghatározásához, a lejátszódó folyamatok leírásához. A különböző komplexek ESR-, NMR-spektroszkópiás és a röntgendiffrakciós vizsgálata több helyen, több kutatócsoportban, így az ELKH-ban, az ELTE-n, a DE-n is folyik, míg a PTE-n, BME-n, ELKH-ban és a DE-n folyó elméleti kémiai számítások elméleti síkon becsülik meg a feltételezett komplexekre jellemző paramétereket.

Ez a felsorolás azokat a legfontosabb alkalmazási lehetőségeket mutatja be, amelyekkel kapcsolatosan intenzív kutatások folynak a magyarországi egyetemeken és kutatóintézetekben, de arra semmiképp nem vállalkozik, hogy a koordinációs kémiai alkalmazások minden aspektusát, kapcsolódási pontját a kémiai kutatások terén számba vegye. Az így kialakuló kép azonban egyértelműen tükrözi, hogy a komplexekkel, a komplexképződési folyamatokkal a természettudomány, az ipar, a környezetvédelem és a hétköznapi élet szinte minden területén találkozunk, azokkal számolni kell.

Várnagy Katalin

az MKE Komplexkémiai Szakcsoportjának elnöke

IRODALOM

- [1] Joó Ferenc, MKL, 2017. szeptember.
- [2] IUPAC Stability Constants Database–Completion of Data Collection up to 2006. Chemistry International – Newsmagazine for IUPAC, 2006, <https://doi.org/10.1515/ci.2006.28.1.26>
- [3] Várnagy Katalin, Ősz Katalin, MKL, 2017. december.