

Napjaink koordinációs kémiája

Több mint 120 éve annak, hogy Alfred Werner alapvető munkájának eredményei közlésre kerültek, majd ezt követően a komplexvegyületek kémiája (a koordinációs kémia) önálló és rohamosan fejlődő tudományterületté vált. Ezen belül ma már rendkívül szerteágazóak és állandóan változnak, bővülnek a kutatott területek, az azokhoz alkalmazható/rendelkezésre álló módszerek köre. A múlt század során jellemző módon jelentős alapkutatói eredmények születtek pl. egyensúlyi állandók meghatározásában, komplexek kinetikai jellemzésében, katalitikus szerepük tanulmányozásában, stb. Mindezen eredményekhez számos magyar kutató is jelentősen hozzájárult. A már elhunytak közül pl. Burger Kálmán, Kőrös Endre, Inczedy János, Simándi László, Barcza Lajos, Gergely Arthur említhető. Szerencsére több olyan neves „előd” is megnevezhető, akik velünk vannak, de tevékenységük már nem ezen területre irányuló, pl. Beck Mihály, Markó László, Horváth Attila, Nagypál István, Papp Sándor. Az alapkutatói eredmények az utóbbi évtizedekben számos területen teremtik meg a hasznosulás lehetőségét. A biológia és a környezettudomány például, nagyon sok olyan gyakorlati problémát vet fel, amelyek a fémionok jelenlétével, szerepével kapcsolatosak. Napjainkban igen eredményesen folynak többek között azok a biokoordinációs/bioszervetlen kémiai kutatások, amelyeknek céljai között szerepel, hogy feltárjon, értelmezzen és a kémia nyelvén fogalmazzon meg hiteles magyarázatot biológiai folyamatokra, jelenségekre, továbbá segítse ezen ismeretek átvitelét orvosi diagnosztikai, gyógyászati, szerves szintézisbeli, környezetvédelmi új, hatékony eljárások, technológiák kifejlesztésére.

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya, a Magyar Tudomány Ünnepe 2015. évi rendezvénysorozatának részeként, „Napjaink koordinációs kémiája” címmel tudományos ülést szervezett 2015. november 11-én, melynek keretében, elsősorban néhány biokoordinációs/bioszervetlen kémiai kutatás közelmúltbeli eredményeit ismertették az előadók. Az előadásokkal kívántuk szemléltetni a nemzetközileg is kiemelkedő koordinációs kémiai kutatások eredményeit pl. az alábbi területeken: (i) Metalloenzimek szerkezetének és az általuk katalizált folyamatok kémiai mechanizmusának megismerésére irányuló kutatások (szerkezeti, illetve funkcionális modellek révén). Ez egyrészt jelenti az életfolyamatok modellezését célzó alapkutatót, másrészt un. biotranszformációs reakciók kidolgozását, aminek esetleg gyakorlati jelentősége is lehet (ii) A neurodegeneratív elváltozások kifejlődésében szerepet játszó fehérjék komplexképzési folyamatainak megismerése céljából végzett bioszervetlen kémiai kutatások. A mikroorganizmusok vas-felvételében kulcsszerepet játszó és gyógyászati jelentőségű hidroxámsav-alapú sziderofórok és egyéb hidroxámsavak szelektív fémionmegkötését befolyásoló tényezők feltárása. (iii) A ritkaföldfém-amino-polikarboxilát komplexek kutatása, ami kiemelten a mágneses rezonancia képalkotás (MRI) kontrasztanyagainak, elsősorban a gadólińium-komplexeknek (de más, pl. átmeneti fémionok (Mn(II), Cu(II)), főcsoportbeli elemek kationjai (Ca(II), Sr(II), Ga(III), In(III), Tl(III), Bi(III) komplexeinek is) kémiai vizsgálatát, új ligandumok szintézisét, a komplexek egyensúlyi, kinetikai és szerkezeti jellemzését, a szerkezet-hatás összefüggések feltárását célozza. (iv) Elsősorban gallium- és platinafém komplexek körében több laboratóriumban is folytatott széleskörű kutatások (geometria, összetétel, töltés, termodinamikai stabilitás, ligandumcsere folyamatok, redoxi tulajdonságok stb. vizsgálata) számos ligandum(család) bevonásával. Bizonyítottan (vagy potenciálisan) rákellenes hatású fémkomplexek tanulmányozása. (v) Fémkomplex alapú katalizátorrendszerek aktivitásának és szelektivitásának szisztematikus növelésére irányuló (kísérleti és számítási módszerekkel történő) kutatások. (vi) Toxikus fémionok (pl. Hg^{II}, Cd^{II}) érzékeny, gyors és egyszerű (akár helyszíni) kimutatását lehetővé tevő oligopeptid próba-molekulák kifejlesztése oldatbeli és szilárd hordozón immobilizált formában történő alkalmazásokra. (vii) Arany(I) szupramolekuláris szerkezetekbe beépítése révén kialakított komplexek (melyeknek, újszerű kémiai és hasznos fizikai tulajdonságaik révén, számos területen elképzelhető gyakorlati hasznosításuk is) előállításának és karakterizálásának.

Az elhangzott előadások alapján készültek a Magyar Kémiai Folyóirat jelen számában olvasható dolgozatok, melyek révén az olvasó informálódhat a fent említett koordinációs kémiai vonatkozású kutatások közül néhányának az új eredményeiről, azok gyakorlati jelentőségéről, és az új kutatási trendekről. E dolgozatok szemléltetik, hogy napjaink koordinációs kémiai kutatásai számos területen jelentősen hozzájárulnak hiteles tudományos eredményeken nyugvó és napjaink több, jelentős problémájának megoldására új utakat és lehetőségeket kínáló ismeretek szerzéséhez.

Farkas Etelka