

# Vas-dioxim komplexek Mössbauer-vizsgálata

Lengyel Attila, II. évf., vegyész MSc  
ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Kuzmann Ernő** egyetemi tanár  
ELTE TTK, Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék, Magkémiai Laboratórium

Az oxim vegyületek többek között a rákellenes gyógyszeralapanyagok kifejlesztésében jutnak szerephez. A maximális biológiai szelektivitás gyakran csak bonyolult molekula geometriával érhető el, ennek megfelelően, ebben a kutatásban vas-oxim-származékok előállítására és jellemzésére volt a célunk.

Az előzetes kutatásokban axiális helyzetű ligandumokkal rendelkező vas-dimetil-glioxim komplexeken és vas-tris-dioximokon végeztek Mössbauer-méréseket és DFT számításokat. Megállapították, hogy az axiális helyzetű ligandumok hiányában a vas kettes vegyértékű és nagyspinű állapotban van a vas-bis-dioximokban. Minden más általuk vizsgált esetben kisspinű állapotot találtak az axiális helyzetű ligandumokkal rendelkező vas-metil-etil-dioximokban [1].

Kérdéses, hogy a fent említett kutatásokban tett megállapítások elágazó oldalláncú dioxim komplexekre is igazak-e, vagy a felhasznált dioximtól függően változhat a vas spinállapota? Kérdéses lehet továbbá az axiális helyzetű más típusú ligandumok hatása is a vas spinállapotára. Annak a megállapítása is céljaink közt szerepelt, hogy sikerült-e a kívánt terméket előállítanunk? Ehhez szorosan kapcsolódik az a kérdés, hogy sikerült-e elkerülnünk a minta szennyeződését?

A jelen vizsgálatokhoz az  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer-spektroszkópia módszerét alkalmaztuk, ami szelektíven tudja vizsgálni a különböző vas szpecieket.

Az új vas-dioxim komplexek preparációjának számos nehézsége ellenére, sikerült szennyezés mentes egyfázisú terméként előállítanunk háromféle új vas-dioxim komplexet, ezek:  $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{diox})_3(\text{BOH})_2]$ ,  $[\text{Fe}(\text{Me-i-propil-DioxH})_2(2\text{-imidazolidon})_2]$ ,  $[\text{Fe}(\text{Me-i-propil-DioxH})_2(2\text{-amino-pirimidin})_2]$ . Az együttműködő partnereink várakozásai szerint ezek a komplexek egyes rákos megbetegedések kezelésére szolgáló gyógyszerek alapanyagául szolgálhatnak.

Az új vas-dioxim komplexekre jellemző Mössbauer-paramétereket meghatároztuk. Kitűnt, hogy a vas-dioxim komplex előállítását célzó preparációk sikeressége könnyen ellenőrizhető Mössbauer-spektroszkópiával.

A Mössbauer-paraméterek alapján meghatároztuk ebben a három vas-dioxim komplexben a vas spin állapotát: –  $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{diox})_3(\text{BOH})_2]$  – kisspinű a vas;  
–  $[\text{Fe}(\text{Me-i-propil-DioxH})_2(2\text{-imidazolidon})_2]$  – nagyspinű a vas;  
–  $[\text{Fe}(\text{Me-i-propil-DioxH})_2(2\text{-amino-pirimidin})_2]$  – nagyspinű a vas.

Fényt derítettünk egy nem várt érdekes jelenségre is: a dioximokhoz kapcsolt elágazó oldalláncok jelentős hatással lehetnek a vas spin állapotára. A planáris részhez kapcsolt különböző ligandumokkal spinváltást idézhetünk elő a központi vas atomban – ennek kihasználása a későbbi biológiai alkalmazásokban még hasznos lehet.

1 Kuzmann E. et al. 2012: Mössbauer study of novel iron(II) complexes with oximes in low spin and high spin states. – *Radiation Physics and Chemistry*. pp1 632-634.