

Részletes beszámoló

1. Munkánk során részletesen tanulmányoztuk a kitozán (Chit) és a Fe(III) között vizes oldatokban lejátszódó kölcsönhatásokat pH-metriás és viszkozimetriás módszerrel valamint dinamikus fényszórással. A szilárd halmazállapotban előállított Fe(III)-Chit mintákat IR-spektroszkópiával, illetve elektronmikroszkópiával jellemeztük. Vizes oldatban Chit jelenlétében a Fe(III) oxihidroxid (FeOOH) csapadék szabad szemmel is megfigyelhető képződése eltolódott a nagyobb pH-k felé, ami (első közelítésben) a Fe(III) és a polimer közötti kölcsönhatásra utalna. A közvetlen (Werner típusú) komplexképződés azonban kizárható a pH-metriás titrálási görbék additivitása, valamint polimer oldat viszkozitásának és IR-spektrumának vas(III)-hozzáadástól való függetlensége miatt. A vas(III)-at és Chit-t tartalmazó oldatokból nyert minták TEM felvételein 5-10 nm átmérőjű, különálló FeOOH nanorészecskéket figyeltünk meg, míg dinamikus fényszórásmérések alapján néhány száz nm-es hidrodinamikai átmérőjű részecskék jelenlétét bizonyítottuk. Adataink azt mutatták, hogy a Chit szterikus stabilizátorként viselkedik, és gátolja a szubkolloidális FeOOH részecskék makroszkópikus aggregációját. A vas(III) és Chit közötti kölcsönhatások segítségével egyszerűen és olcsón olyan nanoméretű FeOOH részecskék előállítása lehetséges, amelyek morfológiailag nagyon hasonlóak a Fe(III) magot tartalmazó fehérjéhez, a ferritinhez. **(MPubl (2), TKKonf, Nkoop)***

A munkából született (2003-ban megjelent) közleményre ez idáig közel 20 független hivatkozást kaptunk. Emellett az eredmények közvetlen gyakorlati alkalmazással is kecsegtetnek. Mivel Fe(III)-Chit „komplex”-ből (csakúgy, mint más, Fe(III)-poliszacharid komplexekből is) vasra nézve több mol dm⁻³ koncentrációjú oldatok (valójában: stabil vizes szuszpenziók) is előállíthatóak, ezek a rendszerek alkalmasak lehet arra, hogy modellezzék az emberi szervezetben előforduló FeO(OH) lerakódásokat, olyanokat mint amelyek pl. az emberi agyban mikroszkopikus vérzések során létrejövő vérömlenyekből képződnek. Fe(III) jelenlétére érzékeny műszeres diagnosztikai módszerek (mint amilyen pl. az MRI egy újabban kifejlesztett változata, a Susceptibility Weighted Imaging, SWI), lehetővé teszik ezek *in vivo* kimutatását. A munkánk során feltárt sajátságok alapján a Fe(III)-Chit rendszer alkalmas lehet e vérrögök modellezésére illetve ebből adódóan az SWI módszer *in vitro* kalibrációjára illetve a Fe(III)-Chit rendszer közvetlen gyakorlati alkalmazására. (Az erre vonatkozó kísérleteink, amelyeket a Dél-Kaliforniai Loma Linda Egyetem munkatársaival együttműködésben végzünk, jelenleg is folyamatban vannak.) **(Proj, Nkoop)**

2. Megvizsgáltuk azon paramétereket, amelyek a Chit pH-potenciometriából számítható dezacetilezettségi fok (DDA) értékeinek pontosságát alapvetően befolyásolják. Megállapítottuk, hogy a minták tapadónedvesség-tartalma jelentős hibát okozhat a számítási eredményekben, mivel ez akár a 15 m/m%-ot is elérheti. Emellett néhány esetben szükséges korrekcióba venni a minták hamutartalmát, ami akár 1 m/m% is lehet. Megállapítottuk, hogy a titrálási görbék kiértékelésénél fontos szerepe van az ekvivalenciapont-meghatározás módjának: a differenciálással nyerhető és a Gran-módszer felhasználásával számított ekvivalenciapontokhoz tartozó lúgfogyás értékei között jelentős eltérést tapasztaltunk. Megfigyeltük, hogy az oldatkészítésnél a polimerrel együtt minimális mennyiségű extra sav (maximum 1mol%) is kerülhet a szilárd Chit-nal a rendszerbe. Alkalmazva az összes fent említett korrekciót, a pH-potenciometriából számított DDA értékek néhány százalékon belül megegyeztek azokkal, melyeket a ¹H-NMR és FT-IR spektroszkópiái adatok alapján határoztunk meg. E nagyszámú korrekció körülményessé és nehézkessé teszi a pH-metriás módszert a DDA pontos meghatározására. **(MPubl, HKonf, TKKonf, Dipl, Nkoop)**

3. Részletesen megvizsgáltuk és optimalizáltuk a mukopoliszaharidok pontos összetételének megállapítására alkalmazott Dische-féle spektrofotometriás módszert. A kapott eredményeket összehasonlítottuk az acetamid csoportot (peptidkötést) tartalmazó poliszaharidok távoli UV tartományban mérhető elnyelésének felhasználásával kapott adatokkal. Megállapítottuk, hogy utóbbi módszer csak tájékoztató jellegű adatok származtatására alkalmas, és megbízható analitikai információkat csak a hosszadalmasabb, de jóval pontosabb Dische féle módszerrel tudunk nyerni. **(Proj, Dipl)**

4. Megállapítottuk, hogy a dextrans vízoldékony [dialkil-Sn(IV)]²⁺ vegyületekkel nem képez a hidrolitikus bomlásnak ellenálló stabil komplexeket, ugyanakkor sikeresen előállítottuk különbözőképpen funkcionizált karboximetilcellulóz (CMC) származékok szilárd [dimetil-Sn(IV)]²⁺ komplexeit. Utóbbi komplexek esetében szisztematikusan változtattuk a komplexek előállításának paramétereit (pH, fém:ligandum arány) és a komplexképző poliszaharid tulajdonságait (molekulatömeg, funkcionizáltság foka). A komplexek ¹¹⁹Sn-Mössbauer és IR-spektrumai alapján megállapítottuk, hogy az Sn(IV) centrum körül trigonális-bipiramisos (Tbp) illetve oktaédes (O_h) geometria alakul ki, és a karboxilát csoport kötésmódja elsősorban monodentát jellegű. Megállapítottuk, hogy a kialakuló komplexek szerkezetét elsősorban az előállítás pH-ja határozza meg, míg abban az egyéb paraméterek (pl. a CMC molekulatömege ill. funkcionizáltsági foka, ill. a fém-ligandum arány) alárendelt szerepet játszanak. **(MPubl, HKonf, TKKonf, Dipl, Proj, Diakk, Nkoop)**

Előállítottuk egy sor mukopoliszacharid (heparin, CHSA és CHSC, hyaluronsav, dermatán-szulfát) [dimetil-Sn(IV)]²⁺ komplexeit szilárd állapotban, valamint meghatároztuk és elemeztük azok ¹¹⁹Sn-Mössbauer spektrumait. **(Dipl, Nkoop)**

5. Előállítottuk a kondroitin-szulfát-A (CHSA) mukopoliszacharid proton- és különböző fémkomplexeit (Ca(II), Mg(II), Zn(II), Cu(II), Fe(III)) mind oldatban, mind gyorsfagyasztással és liofilizálással szilárd állapotban. Az előállítás során változtattuk a fém- ligandum arányt, és Cu(II), valamint Fe(III) komplexek esetén az oldatok pH- ját. Az előállított komplexeknek felvettük IR-, és Raman- spektrumait, azok pH-függése alapján azonosítottuk a potenciális donorcsoportokhoz rendelhető rezgési frekvenciákat (karboxil/karboxilát, amid és szulfonát). A számítógépes felbontással nyert rezgési sávok között találtunk egy, feltehetően amid csoporthoz rendelhető sávot, melynek intenzitása változik a pH változtatásával, annak ellenére, hogy az adott körülmények között az amid csoport nem protonálódik. Noha ennek tisztázása további vizsgálatokat igényel, feltehető, hogy a sáv az amidcsoport és a karboxil csoport protonja közötti, szilárd fázisban fellépő kölcsönhatással értelmezhető. Megállapítottuk továbbá, hogy a szulfonát csoport egyik tanulmányozott fémion koordinációban sem vesz részt, ez a megfigyelésünk összhangban van a CHSA-ra korábban más kutatócsoportok által közölt adatokkal. Méréseink további eredményeként megállapítottuk, hogy valamennyi fémion a poliszacharid karboxilát csoportjához koordinálódik. A karboxilát csoportok rezgési sávjainak Fe(III) esetében tapasztalt változásaiból arra következtettünk, hogy magasabb pH-kon a cukor deprotonálódott alkoholos -OH csoportjai is részt vehetnek a fémion megkötésében. Megállapítottuk, hogy a komplexképződés hatására a CHSA karboxilát csoportok szimmetrikus vegyértékrezgésének hullámszámában bekövetkezett változásokat gyakorlatilag megegyeznek a heparinra mások által kapott analóg értékekkel. **(Proj, Dipl)**

6. Kísérleteket folytattunk szintetikus magnetit nanorészecskék vízoldékony poliszacharidokkal történő stabilizálására, és megvizsgáltuk, hogy a poliszaharidok miképpen befolyásolják a magnetit nanorészecskék morfológiáját és részecskeeloszlását. Az egyik esetben az irodalomból ismert, soklépéses szintézist (aminek eredményeként

monodiszperz 5 ± 1 nm átmérőjű magnetit nanorészecskék képződnek) alkalmaztunk. A kapott terméket elektronmikroszkópiás és porröntgendiffraktometriás módszerrel vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy a szintézis ill. a magnetit képződésének korai fázisában CMC-vel perturbált rendszerekben nagyobb átlagos részecskeméretű, míg a késői fázisban perturbált rendszerekben jobban kristályosodott magnetit képződése figyelhető meg. Egy másik (adalékanyag nélkül 8 ± 2 nm-es magnetit nanorészecskék előállítására alkalmas) szintézisből kiindulva és növekvő mennyiségben CMC-t adva a rendszerhez a részecskeméret CMC-koncentrációval arányos csökkenését figyeltük meg. Mivel részecskeméret csökkenése csak a polimerkoncentrációtól függ, és független az adalékanyag molekulatömegétől vagy funkcionálizáltsági fokától, a módszer alkalmas magnetit nanorészecskék méretének pontos szabályozására. **(MPubl, KKonf, HKonf, Proj, Dipl)**

7. Kísérleteket folytattunk olyan Fe(III) komplexek előállítására és lokális szerkezetének meghatározására, amelyekben a ligandumok funkcionálisan modellezik a belőlük felépíthető poliszacharidok meghatározott sajátságait. Előállítottuk a D-fruktóz és a D-glukonát Fe(III) komplexeit, felvettük és értékeltük a képződött komplexek oldatröntgendiffraktogramjait. A Fe(III) lokális szerkezete e komplexekben, oldatfázisban EXAFS mérések alapján már ismert, így az oldatröntgendiffraktometriás szerkezeti adatok lehetővé teszik, hogy összehasonlítsuk ugyanannak a rendszernek két független módszerrel kapott lokális szerkezeti adatait. Megállapítottuk, hogy a két független módszerrel kapott elsődleges Fe-O távolságok gyakorlatilag megegyeztek, a második koordinációs szférában található távolságok viszont már jelentősebb eltérést mutattak. **(Diákk, Dipl, HKoop, NKoop)**

8. Előállítottuk egy sor mukopoliszacharid (heparin, CHSA és CHSC, hyaluronsav, dermatán-szulfát) Fe(III) komplexeinek koncentrált vizes oldatát és felvettük azok oldatröntgen diffraktogramjait. A kapott kísérleti eredmények értékelése jelenleg is folyamatban van, az oldatokból izolált szilárd komplexek részletes EXAFS vizsgálatára ez év májusában, a Lundi Egyetem MaxLab kutatólaboratóriumában pályázati úton nyert EXAFS gépidő felhasználásával fog sor kerülni. **(Diákk, Dipl, HKoop, NKoop)**

9. Részletesen tanulmányoztuk a CHSA nátrium és magnézium sója vizes oldatainak dielektromos relaxációs spektroszkópiai (DRS) viselkedését. A spektrumok alapján lehetőség nyílt a polimer és az oldószer víz relaxációs folyamatainak egyidejű tanulmányozására. Megállapítottuk, hogy a Na_2CHSA vizes oldatának DRS spektrumán a tiszta vízre jellemző ~ 18 GHz-nél található relaxációs folyamat mellett ~ 0.2 GHz körül egy újabb, feltehetően a poliszacharidhoz tartozó relaxációs folyamat jelenik meg. Az oldatokban a víz relaxációs ideje megegyezik, a (vízkoncentrációval arányos) amplitúdója azonban jelentősen kisebb, mint a tiszta vízre kapott megfelelő irodalmi adat. Ez azt jelenti, a víz teljes mennyiségének csak bizonyos részét képes a DRS detektálni, a „hiányzó” oldószer minden bizonnyal a hidratáció miatt vált relaxációjában gátolttá. Megállapítottuk, hogy szobahőmérsékleten a polimerkoncentrációtól és az ellenion minőségétől függetlenül a dimer egységre eső kötött vízmolekulák száma, $Z_{\text{ib}}(\text{CHSA}^{2-}) = 18.0 \pm 3.5$. HCl hozzáadására, amikor is a poliion karboxilát csoportja ($pK = 3.2$) részlegesen protonálódik, az Z_{ib} a kísérleti hibahatáron belül állandónak adódott, ebből következően a CHSA^{2-} hidratációs számát elsősorban a töltetlen, poláros csoportok vízmegkötése határozza meg, míg a poliion nettó töltése kevésbé befolyásolja. $Z_{\text{ib}}(\text{CHSA}^{2-})$ a hőmérséklet növelésének hatására csökken, ez jól értelmezhető a hidratációnak a hőmozgás növekedés hatására bekövetkező csökkenésével. A polimer relaxációs folyamatával kapcsolatban megállapítottuk, hogy az a polimerhez kötött ellenionoknak a viszonylag hosszabb lineáris polimerszégmensek mentén létrejövő

polarizációjából adódik, és ez határozza meg a polimer effektív oldatbeli átmérőjét is. Adataink, amelyeket a Manning elmélet alkalmazásával nyertünk a polimer relaxációs idejének és amplitúdójának felhasználásával, azt mutatják, hogy a polimer fluktuációs hossza (az átlagos szegmenshossz, amely mentén az ellenionok elmozdulhatnak) $c = 0$ -nál 31,8 nm, ami 50 g/L koncentrációnál 11,5 nm-re csökken. Ezek az adatok megegyeznek azokkal az átlagos legközelebbi szomszéd távolságokkal, amelyeket független kisszögű röntgenszórási mérések alapján nyertünk. További eredmény a Manning modellből, hogy a kötött ellenionok mozgékonyasága *jelentősen meghaladja* a szabad ellenionok mozgékonyaságát (vagyis gyorsabb diffúzióval), a jelenség feltehetően az ellenionok kooperatív mozgásával kapcsolatos. Eredményeink igen meglepőek és meggyőződések, hogy azok a szélesebb fizikai-kémikus társadalom érdeklődésére is számot tarthatnak. **(B Publ, HKonf, Diákk, Proj, NKoop)**

10. Tanulmányoztuk szerves polimer templátok TiO_2 nanorészecskék morfológiájára kifejtett hatását. Mivel a szerves templát jelenléte (ld. 11. pont is) hátrányosan befolyásolja a kapott minta fotokatalitikus aktivitását, annak eltávolítása közismerten kritikus lépése a szintézis eredményeként kapott TiO_2 nanoszerkezetére és fotokatalitikus aktivitására. Megállapítottuk, hogy értéklehető fotokatalitikus aktivitás eléréséhez elengedhetetlen a minták hőkezelése, ami viszont a mezopórusos szerkezet összeomlását és az átlagos részecskeméret drasztikus növekedését (vagyis a katalizátor fajlagos felületének csökkenését) eredményezi. A minták anatóz tartalma és fotokatalitikus aktivitása között egyértelmű összefüggést mutattunk ki. **(MPubl, KKonf, TKKonf, PhD, NKoop)**

11. TiO_2 nanorészecskéket állítottunk elő különböző (részben az irodalomból ismert, részben általunk kidolgozott) eljárásokkal. Részletesen tanulmányoztuk dextrans hozzáadásának hatását a képződő TiO_2 nanorészecskék szerkezetére. Megállapítottuk, hogy az átlagos részecskeméret a poliszacharid jelenlétében jelentősen csökken, viszont az így kapott fotokatalizátorok nagyon rossz fotokatalitikus aktivitást mutattak, ami feltehetően a katalizátor felületén hátramaradt szervesanyag maradékokkal van összefüggésben. Részletesen vizsgáltuk szén-nanocsövek felületén létrehozott TiO_2 fotokatalizátorok fotokatalitikus aktivitását. Részletesen tanulmányoztuk a koncentrált HCl oldatokból kiváló TiO_2 nanorészecskék szerkezetét és morfológiáját. Megállapítottuk, hogy megfelelően nagy koncentrációjú HCl oldatokból (a szakirodalomban közölt adatokkal ellentétben) a reakcióelegy koncentrációjától függetlenül 5-10 nm átmérőjű anatóz/rutil keverék nanokristályok válnak ki. Méréseink alapján a minták anatóz tartalma a csökkenő HCl és a csökkenő Ti(IV)-tartalommal szisztematikusan növekszik, ily módon az eljárás alkalmas előre megtervezett fázisösszetételű, monodiszperz TiO_2 fotokatalizátorok előállítására. Eljárást dolgoztunk ki a nanométeres mérettartományba eső TiO_2 fotokatalizátor részecskék lánghidrolízissel történő reprodukálható előállítására. Megállapítottuk, hogy a fotokatalizátorokban az anatóz/rutil arány valamint a kristályosodás foka jelentős mértékben függ a lánghidrolízishez használt gáz áramlási sebességétől és a prekursor adagolási sebességétől is. **(KKonf, HKonf, TKKonf (2), Dipl, PhD (2))**

12. Kísérleteket folytattunk biopolimer molekulákat funkcionálisan modellező, kis molekulatömegű ligandumok Sn(IV)-organikus komplexeinek előállítására és lokális szerkezetének meghatározására.

22 normál- és tercier-dibutilón(IV) komplexet állítottunk elő, amelyekben a ligandumok $-\text{OH}$ (vagy $-\text{C}=\text{O}$) vagy $-\text{OH}$ és $-\text{COOH}$ csoportot és aromás nitrogén donoratomot tartalmaztak. A vegyületekben a ligandumok kötőhelyeit FT-IR spektroszkópiai módszerrel határoztuk meg és megállapítottuk, hogy a ligandumok, a fenolos

hidroxilcsoporton és a monodentát módon koordinálódó karboxilát csoporton keresztül kapcsolódnak. Mössbauer spektroszkópiai vizsgálatok alapján a vegyületek trigonális bipiramis vagy oktaédes szerkezetűek. Két komplex szerkezetét Röntgen-diffrakciós módszerrel is meghatároztuk, amelyek cisz-oktaédesnek bizonyultak. **(MPubl, HKonf, Dipl, PHd, Proj, Diákk, NKoop)**

A [klorin (21H,23H-porfin-2-propionsav, 18-karboxi-20-(karboximetil)-8-etén-13-etil-2,3-dihidro-3,7,12,17-tetrametil-(2*S*-*transz*)-] négy ónorganikus komplexét állítottuk elő szilárd állapotban. A vegyületek szilárd ill. oldatfázisú szerkezetét FT-IR, ¹¹⁹Sn Mössbauer, ¹H és ¹³C NMR spektroszkópiai módszerekkel határoztuk meg. Szilárd állapotban az (R₂Sn)₃(klorin)₂·2H₂O komplexek hatos koordinációs számú négyzetes bipiramis, *transz*-R₂SnO₄ polimer egységeket tartalmaznak. Ezzel szemben az (R₃Sn)₃klorin·2H₂O összetételű vegyületek Tbp szerkezetű polimerek, amelyekben *eq*-R₃SnO₂ egységek vannak. Oldatban a [trimetilón(IV)]⁺ komplexek tetraédes (T_h) szerkezetűek. **(MPubl, NKoop)**

A [dimetilón(IV)]²⁺ és a [trimetilón(IV)]⁺ kationok és a Na₂foszfomicinát kölcsönhatását tanulmányoztuk pH-potenciometrikus valamint UV-Vis módszerekkel 25 °C és 0.1 M ionerősségnél (NaClO₄), vizes oldatban. A következő részecskék képződését detektáltuk: Me₂SnLH, Me₂SnL, Me₂SnL₂, Me₂SnLOH, Me₂SnL(OH)₂, Me₃SnL, Me₃SnL(OH)₂. A foszfomicin számos új ónorganikus komplexét szilárd állapotban is előállítottuk. A vegyületek szerkezetét FT-IR, Mössbauer spektroszkópia, valamint Röntgen diffrakciós mérésekkel határoztuk meg. Ezek alapján a *bisz*-trimetilón(IV)-foszfomicinát komplex egykristálya monoklin rendszerben kristályosodik, tércsoportja P2₁. Az FT-IR és a ¹¹⁹Sn Mössbauer spektroszkópiai mérések eredményei szerint mind a di- mind a triorganoón(IV) kiindulási vegyületekkel Tbp szerkezetű komplexek képződtek. A [foszfomicinát]²⁻ ligandum PO₃²⁻ csoportja koordinálódik a központi atomhoz, és így alakul ki az egydimenziós polimer szerkezet. **(BPubl, NKoop)**

Az *N*-nitrozo-*N*-fenilhidroxilamináto ligandum hat ónorganikus komplexét állítottuk elő szilárd állapotban. FT-IR spektroszkópiai mérések alapján a ligandum kelát módon koordinálódik, vagy hidat képez két központi fémion között. Minden vegyület geometriája *transz*-O_h. A ¹Bu₂Sn(kupf)₂ komplexet sikerült egykristályként előállítani. A Röntgen diffrakciós mérések eredménye szerint a vegyület négyzetes bipiramis szerkezetű, ahol a *terc*-butilcsoportok *transz*-helyzetben vannak. **(MPubl, HKonf, Proj, Diákk, NKoop)**

Nagyszámú [trifenilón(IV)]⁺ komplexet állítottunk elő. A ligandumok –OH (–C=O), vagy –COOH és aromás nitrogén donorcsoportot vagy atomot tartalmaztak. FT-IR spektroszkópiai mérések alapján karboxilát csoport egyfogúként, vagy hídként koordinálódik. Úgy találtuk, hogy a hidroxipiridin és pirimidin komplexekben a ligandumok fenolos formában koordinálódnak. A vegyületek nagy része Tbp vagy O_h szerkezetű. A trifenilón(IV)-3-fenolátó-2(1H)-piridon-O,O' komplexet egykristályként nyertük. A komplexben az ón központi atom Tbp geometriájú. Azt találtuk, hogy a 2-pikolinsav komplex *transz*-fenilizáció megy át, és difenil- és tetrafenilón(IV) vegyület képződik. Ez az irodalomban a második ilyen példa. **(MPubl, HKonf, NKonf, Proj, Diákk, Dipl, PhD, NKoop)**

A MCl_n[mezo-tetra(4-szulfonatofenil)porfirin], a (R₂Sn)₂MCl_n[mezo-tetra(4-szulfonatofenil)porfirinát]_s és a (R₃Sn)₄MCl_n[mezo-tetra(4-szulfonatofenil)porfirinát]_s, [ahol: M = Fe(III), Mn(III): n = 1, R = Me, Bu; Ph; M = Sn(IV): n = 2, R = Me, Bu] ónorganikus komplexeit állítottuk elő szilárd állapotban. A vegyületeket FT-IR, Mössbauer és ¹H, ¹³C NMR spektroszkópiai módszerekkel tanulmányoztuk. A gyűrűn

kivül levő féminon elektronsűrűsége nem befolyásolja az ónorganikus kationok kötémódját, amelyek mindig az oldalláncban levő szulfonatofenil csoport. Ezeket az információkat a Mössbauer spektroszkópiai mérések adataiból vontuk le. A külső szférában levő ónorganikus kationok O_h vagy T_{bp} polimer szerkezetű, amelyben a szulfonát csoport kelát vagy híd ligandumként viselkedik. A $(Me_3Sn)_4Sn(IV)Cl_2$ [meso-tetra(4-szulfonatofenil)porfirinát] és két modell vegyületének a $Me_3Sn(PS)(HPS)$ és a $Me_2Sn(PS)_2$ [HPS = fenilszulfonsav] szerkezetét tanulmányoztuk ONIOM módszerrel. Ez a megközelítés is alátámasztotta az IR és a Mössbauer spektroszkópiai módszerekkel nyert eredményeket. **(MPubl, NKoop)**

Elsőként az irodalomban meghatároztuk a DNS és alkotórészei és az ónorganikus kationok között képződött komplexek lokális szerkezetét. Megállapítottuk, összhangban az előző munkáinkkal, hogy az ónorganikus kation a foszfátcsoporthoz koordinálódik. A mért kötéstávolságok közeli a szénhidrátok ónorganikus komplexeiben mértékhez. **(MPubl, NKoop)**

13. A projekt futamideje alatt több olyan összefoglaló közleményt írtunk, amelyhez felhasználtuk a pályázat által biztosított anyagi forrásokat:

- a. Könyvfejezetet írtunk a szénhidrátok (beleértve a makromolekulájú ligandumokat is) fémkomplexeinek egyensúlyi viszonyairól, szerkezetéről és biológiai hatásáról **(MPubl)**;
- b. Mintegy 600 szakirodalmi forrás feldolgozásával összefoglaló munkát írtunk az ónorganikus komplexek egyensúlyi viszonyairól, szerkezetükről és biológiai aktivitásáról **(MPubl, NKoop)**;
- c. Összefoglaló közleményt írtunk az ónorganikus komplexek biológiai aktivitásáról, és ugyanebben a közleményben részletesen foglalkoztunk a kiindulási vegyületek biológiai hatásával is **(MPubl, NKoop)**;
- d. Irodalmi összefoglalót írtunk a platinakomplexek kemoterápiás alkalmazásairól a rákos megbetegedések kezelésében **(MPubl)**;
- e. Irodalmi összefoglalót írtunk a fémionok- és fémkomplexek lehetséges kemoterápiás alkalmazásairól **(MPubl)**.

*Az egyes összefoglalók után feltüntetett betűjelek jelentései: **MPubl** – az anyagból publikáció már megjelent vagy közlésre elfogadott; **BPubl** – az anyagból publikáció közlésre benyújtva; **HKonf** – az anyagot hazai konferencián mutattuk be; **KKonf** – az anyagot külföldi konferencián mutattuk be; **TKKonf** – az anyagot konferencián mutattuk be és a konferencia kiadványában teljes terjedelmű közleményt jelentettek meg; **Dipl** – az eredményekből diplomamunka készült; **Diákk** – az eredményekből diákköri dolgozat készült; **Proj** – az eredmények projektmunka dolgozat alapjául szolgáltak; **PhD** – az eredmények PhD munka részét képezik; **HKoop**: részben hazai kooperációban végzett kutatás; **NKoop**: részben nemzetközi kooperációban végzett kutatás