

Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

–0093-07**Molekulový dizajn modelových systémov “modrých” med’natých proteínov ako zdrojov energie**Zodpovedný riešiteľ **Prof .Ing. Stanislav Biskupič, DrSc.**Príjemca **Prof .Ing. Dušan Bakoš, DrSc.****Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený**

1. FCHPT STU Bratislava
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Univerzita Viedeň, Rakúsko
- 2.
- 3.

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

1. 0
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. Arion V. B., Raptá P., Telser J., Shova S. S., Breza M., Lušpai K., Kožíšek J.: Syntheses, Electronic Structures, and EPR/UV-Vis-NIR Spectroelectrochemistry of Nickel(II), Copper(II), and Zinc(II) Complexes with a Tetradentate Ligand Based on S-Methylisothiosemicarbazide. Inorg. Chem. 50, 2918–2931 (2011).
2. M. Hudák, L. Perašinová, S. Biskupič, D. Jayatilaka, J. Kožíšek and L. Bučinský X-ray Constrained Hartree-Fock Wavefunction at the Douglas-Kroll-Hess Level of Hamiltonian. Acta Cryst A66, p. 78–92 (2010).
3. Z. Puterova, J. Valentova, Z. Bojkova, J. Kozisek, F. Devinsky, Synthesis, crystal structure and antiradical effect of copper(II) Schiff base complexes containing five-, six- and unusual

seven-membered rings, Dalton Transactions, 40 (7) 1484-1490, 2011.

4. Šoralova, S; Breza, M., DFT study of bis(picolinato-N,O)-copper(II) complex, Polyhedron, 29, 12, p. 2440-2444, 2010.

5. Šoralova, S; Breza, M; Grof, M. Quantum-chemical study of transition metal complexes with benzene-1,2-dithiolate, Polyhedron, 30, 2, p. 307–314, 2011.

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu sa uplatnia v základnom výskume pri navrhovaní koordinačných zlúčenín s vysokým štandardným elektródovým potenciálom, ktoré by mohli viesť k uplatneniu ako materiály v palivových článkoch. Z metodického hľadiska sa získané výsledky použijú hlavne pri výskume experimentálnej a teoretickej elektrónovej štruktúry koordinačných zlúčenín prechodných prvkov.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Bola vyvinutá stratégia pre vysoko kvalitný experiment a pre získanie experimentálnej elektrónovej štruktúry z difrakčných dát. Presné difrakčné dáta umožňujú získať správny model elektrónovej hustoty. Topologická analýza jednak experimentálnej ako aj teoretickej elektrónovej hustoty nám poskytuje detailnú informáciu o väzbovej situácii v študovaných zlúčeninách. Umožňuje nám zistiť jej hodnotu vo väzbových kritických bodoch, nájsť hodnotu ich Laplaciánu a preskúmať mechanické napätie (t.j. chemickú reaktivitu) v zlúčenine.

Zosyntetizovala sa modelová zlúčenina modrého mednatého proteínu na báze S-metylizotiosemikarbazidového ligandu a jej nikelnatý a zinočnatý analóg a preštudovali sa za použitia rôznych experimentálnych a teoretických metód. Získané výsledky umožnili navrhnúť modifikácie ligandu za účelom získania lepších modelových zlúčenín galaktózy-oxidázy. Prvá z nich už bola v súčasnosti zosyntetizovaná.

Presné rtg. a kvantovo-chemické štúdie komplexov medi v rôznych oxidačných stavoch sa vykonali na lepšie pochopenie redoxných procesov a faktorov, ktoré ich ovplyvňujú. Štruktúry typu mlynského kolesa, napr. octan mednatý, nám poskytli podrobné informácie o spôsobe viazania medi. Prístup založený na topologickej analýze elektrónovej hustoty umožnil odíŕať štyri ekvatoriálne koordinačné väzby Cu-O od dodatočnej nekoordinačnej interakcie v apikálnej polohe.

Na zdokonalenie teoretického popisu elektrónovej štruktúry študovaných zlúčenín sa zohľadnili aj relativistické efekty a/alebo efekty tuhej fázy a implementovali sa do programu TONTO.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

The strategy for high quality X-ray experiment and experimental electronic structure from diffraction data was developed. Accurate diffraction data offer the possibility to obtain the correct model of electron density. The topological analysis of experimental and theoretical electron density gives us more detailed information about bonding in the studied compounds. It allows to estimate its values in bond critical points, to find the value of its Laplacian and to examine the mechanical strain (i.e. chemical reactivity) in the compound.

The blue copper protein model compound based on S-metylizotiosemikarbazide ligand and its nickel and zinc analogues have been synthesized and investigated using various experimental and theoretical methods. The obtained results allowed to propose the ligand modifications to obtain better galactose-oxidase model compounds. The first of them has been synthesized recently.

The precise X-ray and quantum-chemical studies of copper complexes in various oxidation states have been performed for better understanding the redox processes and their

influencing factors. The paddle-wheel structures, such as copper(II) acetate, provided a detailed information on copper bonding. The topological analysis electron density treatment allows to distinguish between four Cu-O equatorial coordination bonds and an additional non-coordination interaction in the apical position.

In order to improve the theoretical description of the electronic structure of the compounds under study the relativistic and/or solid state effects have been included and implemented in TONTO software.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Prof .Ing. Stanislav Biskupič, DrSc.

V Bratislave 30.5.2011

Štatutárny zástupca príjemcu

Prof .Ing. Ján Šajbidor, DrSc.

V Bratislave 30.5.2011

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu