

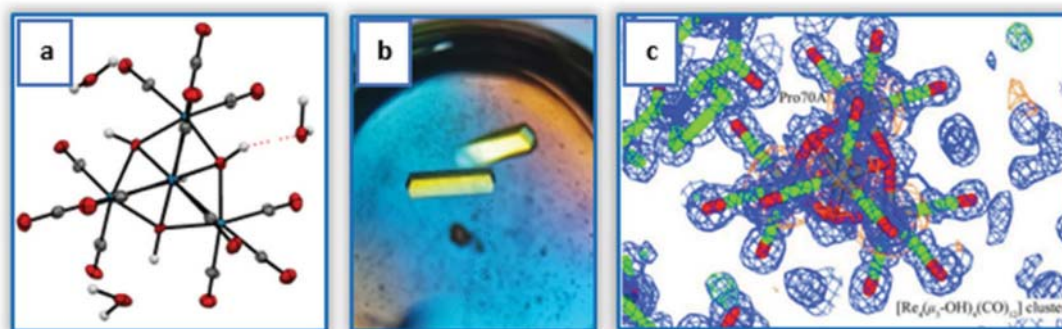
Klein organometaalverbindinge na proteïne – die geheime van molekules in fundamentele kristalruimtes

FJF Jacobs, A Brink

Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat, Suid-Afrika
Korresponderende outeur: Francois Jacobs E-pos: fjjacobs7@gmail.com

Small organometallic molecules to proteins – the secrets of molecules in fundamental crystal space: Since the development of the ^{99m}Tc and ^{188}Re generators, considerable research has been conducted to improve radiopharmaceutical development. This research focuses on using biological mimickers as vectors for targeting specific disease sites. Both small-molecule and macromolecular crystallography are jointly utilised as interoperable tools to advance the field of radiopharmacy.

Sedert die ontwikkeling van die ^{99m}Tc -verwekker en die daaropvolgende bekendstelling van die ^{188}Re -verwekker, is die ontwikkeling van tegnesium en renium radiofarmaseutika van groot belang vir die wetenskaplike gemeenskap (Jürgens et al., 2014). Hierdie navorsing is gefokus op die ontwikkeling van radiofarmaseutika met spesifieke middels as teiken (Top et al., 1995), waardeur die gebruik van chemiese funksionaliteite met biologiese kenmerke as teikenvektore in potensieële radiofarmaseutiese middels gebruik word. Die insluiting van meer as een radionuklid (met ander woorde ^{99m}Tc en $^{186/188}\text{Re}$) vorm 'n sleutelaspek in die sintetisering van 'n dubbele funksionele middel, een met potensieële teranostiese (terapeutiese en diagnostiese) toepassings (Mokolokolo et al., 2018). Om nuwe variasies van radiofarmaseutika te bevorder, word die behoorlike ontwikkeling en begrip van die verskillende komponente wat deel vorm van geneesmiddelontwikkeling vereis, dit wil sê, ligandontwikkeling, kinetiese ondersoeke van moontlike reaksieweë *in vitro* asook begrip van wat *in vivo* kan gebeur (Brink et al., 2022; Jacobs et al., 2021). In hierdie referaat word aangetoon hoe hierdie navorsing toegepas kan word in die ontwikkeling van renium-organometaalkomplekse en hoe kristallografiese ondersoeke gebruik kan word om die kennis van hierdie onderwerp te bevorder deur beide kleinmolekule- en makromolekulêre kristallografie te gebruik.



a: Kristalstruktuur van $fac\text{-}[\text{Re}_4(\text{OH})_4(\text{CO})_{12}]$; b: Liosiemkristalle wat saam met ReAA gekristalliseer is; c: Kristalstruktuur van $fac\text{-}[\text{Re}_4(\text{OH})_4(\text{CO})_{12}]$ in liosiem

Bronnelys

- Brink, A., Jacobs, F.J.F., Helliwell, J.R., 2022, Trends in coordination of rhenium organometallic complexes in the Protein Data Bank, *Journal of the International Union of Crystallography* 9, 180-193. <https://doi.org/10.1107/S2052252522000665>.
- Jacobs, F.J.F., Venter, G.J.S., Fourie, E., et al., 2021, Substitution reactivity and structural variability induced by tryptamine on the biomimetic rhenium tricarbonyl complex, *RSC Advances* 11, 24443-24455. <https://doi.org/10.1039/D1RA03750A>.
- Jürgens, S., Herrmann, W.A., Kühn, F.E., 2014, Rhenium and technetium based radiopharmaceuticals: Development and recent advances, *Journal of Organometallic Chemistry* 751, 83-89. <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2013.07.042>.
- Mokolokolo, P.P., Frei, A., Tsosane, M.S., et al., 2018, Nuclearity manipulation in Schiff-base *fac*-tricarbonyl complexes of Mn (I) and Re (I), *Inorganica Chimica Acta* 471, 249-256. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2017.10.036>.
- Top, S., El Hafa, H., Vessières, A., et al., 1995, Rhenium Carbonyl Complexes of β -Estradiol Derivatives with High Affinity for the Estradiol Receptor: An Approach to Selective Organometallic Radiopharmaceuticals, *Journal of the American Chemical Society* 117, 8372-8380. <https://doi.org/10.1021/ja00137a010>.

Nota: 'n Seleksie van referaatopsommings: Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 3-4 November 2022, Akademia. Reëlingskomitee: Prof Rudi Pretorius (Departement Geografie, Universiteit van Suid-Afrika); Dr Hertzog Bisset (Suid-Afrikaanse Kernenergie-korporasie); Prof Hannes Rautenbach (Kantoor van die Besturende Direkteur, Akademia).