

# Aldehydek Fe-katalizált H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-oxidációs reakciói

## Aldehydes Fe-catalyzed H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-oxidation reactions

VINCZE Bálint<sup>1</sup>, TÖRÖK Patrik<sup>1</sup>, Dr. KAIZER József<sup>1</sup>

PANNON EGYETEM, Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, Biosoerges és  
Biokoordinációs Kémia Kutatócsoport,  
8200 Veszprém Egyetem u. 10,  
e-mail: valentine.vincze@gmail.com

### ABSTRAC

Enzymes function as biocatalysts in nature, and their utilization is currently a highly researched field, as we could potentially eliminate many disruptive and harmful byproducts in industrial processes using enzymes. However, we are not yet capable of mimicking the structure of enzymes and the processes they catalyze. Their study is a difficult task; isolating and handling them is cumbersome, but we can study them through less complex structural and functional models. My research focuses on the investigation of non-heme oxidoreductases, which use dioxygen to oxidize substrate molecules. In my work, I used precursor complexes with a transition metal central atom as synthetic enzyme models. Upon exposure to H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, these form a reactive diiron (III)- $\mu$ -peroxo intermediate. I examined the catalytic and kinetic properties of the resulting particle in oxidation reactions of various aldehydes using GC-MS, cyclic voltammetry, and UV-Vis spectroscopy measurements. In addition, I studied the effects of different coligands on the oxidation reactions. During my research, I mapped the time profile of the catalysis, and through kinetic measurements, I examined the temperature, metal, substrate, and peroxide dependence of the intermediate. Furthermore, I conducted experiments using precursor complexes with different structures to get closer to understanding the functioning of the modeled enzyme.

**Keywords:** biocatalyst, oxidoreductase, diiron(III)-  $\mu$ -peroxo intermediate, coligand

### KIVONAT

Az enzimek a természetben biokatalizátorokként funkcionálnak, felhasználásuk napjainkban igen intenzíven kutatott terület, hiszen képesek lennénk enzimekkel számos zavaró, káros mellékterméket kizárni az ipari folyamatok során. Az enzimek felépítését és az általuk katalizált folyamatokat napjainkban még nem vagyunk képesek leutánozni. A vizsgálatuk nehéz feladat, izolálásuk és kezelésük körülményes, viszont kevésbé bonyolult szerkezeti- és működési modelleken keresztül tanulmányozhatjuk őket. Kutatásom során nem-hem oxidoreduktázok vizsgálatával foglalkozom, amelyek dioxigént használnak fel arra, hogy a szubsztrátmolekulákat oxidálják. A munkám során szintetikus enzim modellként átmenetifém központi atommal rendelkező prekursor komplexeket használtam, amelyekből H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> hatására reaktív divas(III)- $\mu$ -peroxo intermedier keletkezik. A kialakuló részecske katalitikus és kinetikai tulajdonságait különböző aldehydelek oxidációs reakcióiban vizsgáltam GC-MS, Ciklikus voltammetriás és UV-Vis spektroszkópiái mérések segítségével. Különböző tulajdonságú koligandumok hatását is tanulmányoztam az oxidációs reakciókban. A kutatásom alatt feltérképeztem a katalízis időprofilját, kinetikai mérések segítségével tanulmányoztam az intermedier hőmérséklet-, fém-, szubsztrát-, és peroxid-függését is. Továbbá kísérleteket végeztem különböző szerkezetű prekursor komplexek felhasználásával is, hogy még közelebb kerülhessek a modellezett enzim működésének megértéséhez.

**Kulcsszavak:** biokatalizátor, oxidoreduktáz, divas(III)- $\mu$ -peroxo intermedier, koligandum

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönjük a támogatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatalnak (OTKA K142212, TKP-2021-NKTA-21).