

# Új hidroxil-csoportot tartalmazó metilénkék analógok előállítása és vizsgálata

## Synthesis and Investigation of Methylene Blue Analogs Containing Hydroxy Groups

NÉMETI Norbert-Balázs, Dr. LOVÁSZ Tamás

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,  
Magyar Kémiai és Vegyészmérnöki Intézet, Arany János utca 11 szám, 400028 Kolozsvár,  
tel.: 40-264-591998, e-mail: tlovasz@chem.ubbcluj.ro

### ABSTRACT

Methylene blue analogues has applications both in medicine and biology, as compounds in: disinfection, as antibacterial drugs, and also in cell staining [1,2]. We have modelled five methylene blue analogues, by using DFT, B3LYP method, with 6-31G\*\* basis set, to evaluate the relationship between the molecular structure and optical properties. From the five studied analogues, we have synthesized one: the 3,7-bis-[di(hydroxyethyl)-amino]-phenotiazonium-5-iodide, by the substitution reaction of phenothiazinium-tetraiodide with diethanolamine.

The structure of the product was confirmed, using spectroscopical methods. Optical properties were studied using UV-VIS spectroscopy, and then the solvatochromism of this compound was also evaluated in ethanol and dimethyl-sulfoxide. The appearance of solvatochromism and the presence of hydroxyl groups represent an advantage for using this methylene blue analogue in cell staining, and in diagnostics.

**Keywords:** methylene blue, cell staining, molecular modelling, spectroscopy, solvatochromism

### ÖSSZEFOGLALÓ

A metilénkék analógok az orvostudományban és biológiában egyaránt felhasznált anyagok: fertőtlenítésben, gyógyszerként, valamint sejtfestésben is alkalmazott vegyületek. [1,2]

Kutatásunk során modelleztünk öt metilénkék analógot DFT szinten, B3LYP módszerrel, 6-31G\*\* báziskészlet alkalmazásával, a molekulaszervezet és az optikai tulajdonágok közti összefüggés tanulmányozása céljából. Az öt vizsgált molekula közül előállítottuk a: 3,7-bisz[di(hidroxietyl)amino]-fenotiazónium-5-jodidot, fenotiazónium-tetraiodidon dietanolaminnal végzett szubsztitúciós reakcióval. A kapott származék szerkezetét spektroszkópiás módszerek segítségével igazoltuk. Vizsgáltuk optikai tulajdonságait UV-VIS spektroszkópia felhasználásával, valamint tanulmányoztuk a vegyület szolvatokrómiáját is: etanol és dimetil-szulfoxid oldószerekben. A vegyület esetében megfigyelt szolvatokrómia, valamint a hidroxilcsoportok jelenléte, kedvező tulajdonságok a sejtfestésben, diagnosztikában való felhasználás szempontjából.

**Kulcsszavak:** metilénkék, molekulamodellezés, sejtfestés, spektroszkópia, szolvatokrómia

### Felhasznált irodalom:

1. T. Baltac, M. Branişte, C. Ţurcaş, I. Sebe, *U.P.B. Sci. Bull., Series B*, **2012**, 74(4), 61-68
2. A. Gollmer, A. Felgentrager, W. Baumler, T. Maisch, A. Spath, *Photochemical and Photobiological sciences*, **2015**, 14(2), 335-51

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönjük a CNCS-UEFISCDI, PN-III-P4-PCCF-2016-0142 pályázatnak a kutatómunka anyagi támogatását