

Új hidroxil-csoportot tartalmazó metilénkék analógok előállítása és vizsgálata

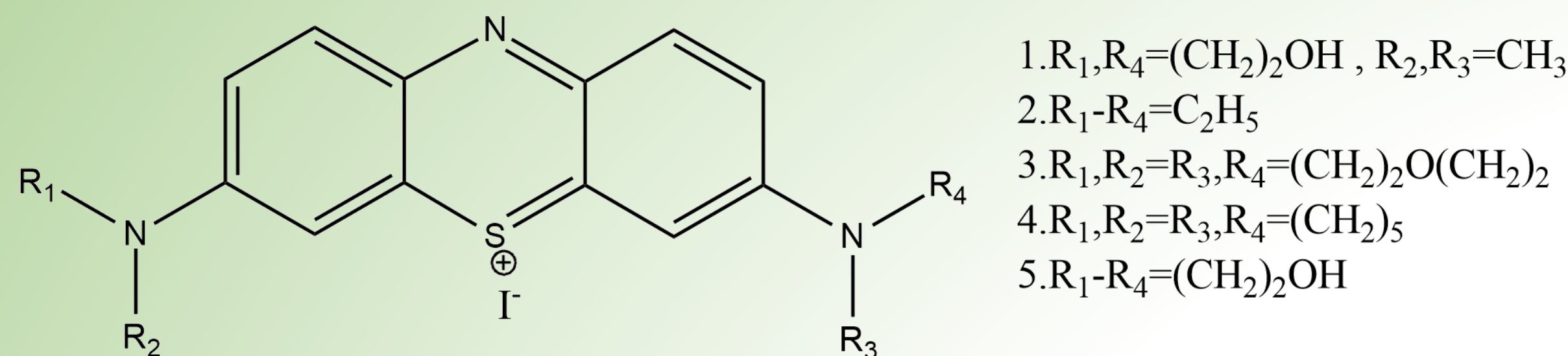
Synthesis and Investigation of Methylene Blue Analogs Containing Hydroxy Groups

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,
 • e-mail: tlovasz@chem.ubbcluj.ro, tel.: 40-264-591998

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 molekulaszerkezet 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-tetraajodidon dietanolammal végzett szubsztitúciós reakcióval.

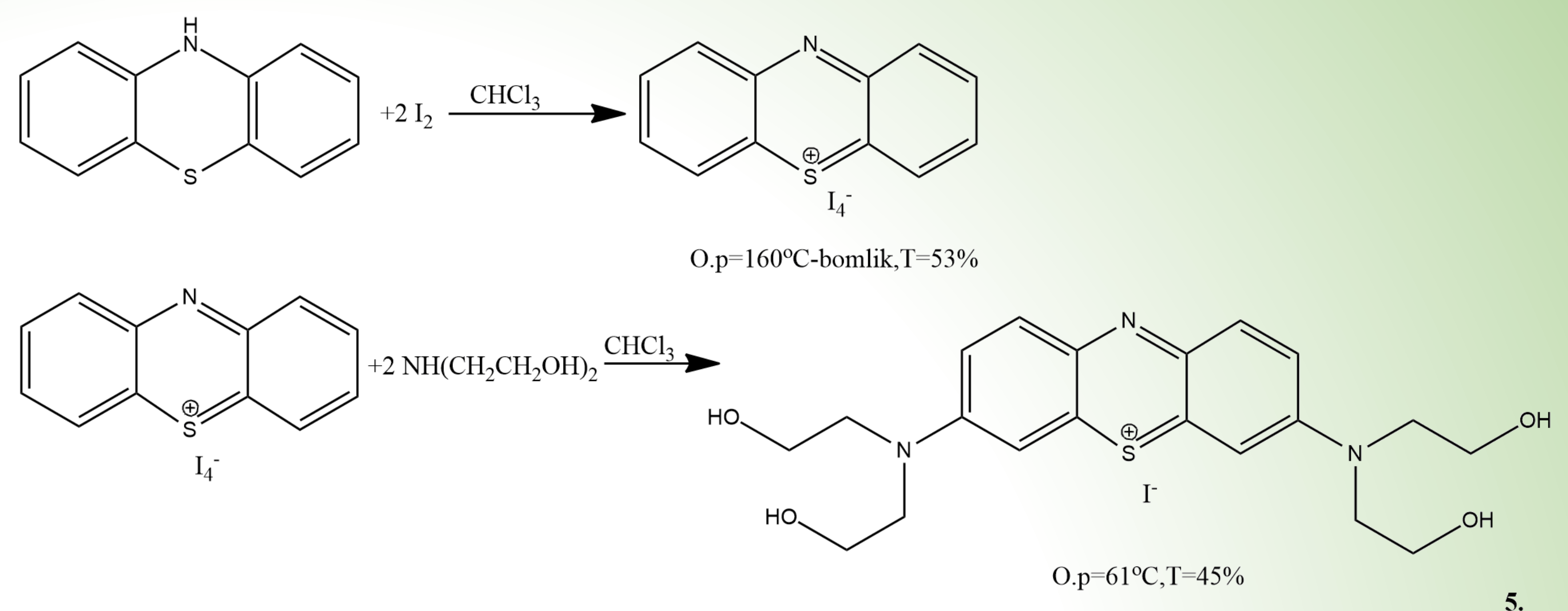
A modellezett metilénkék analógok szerkezetei



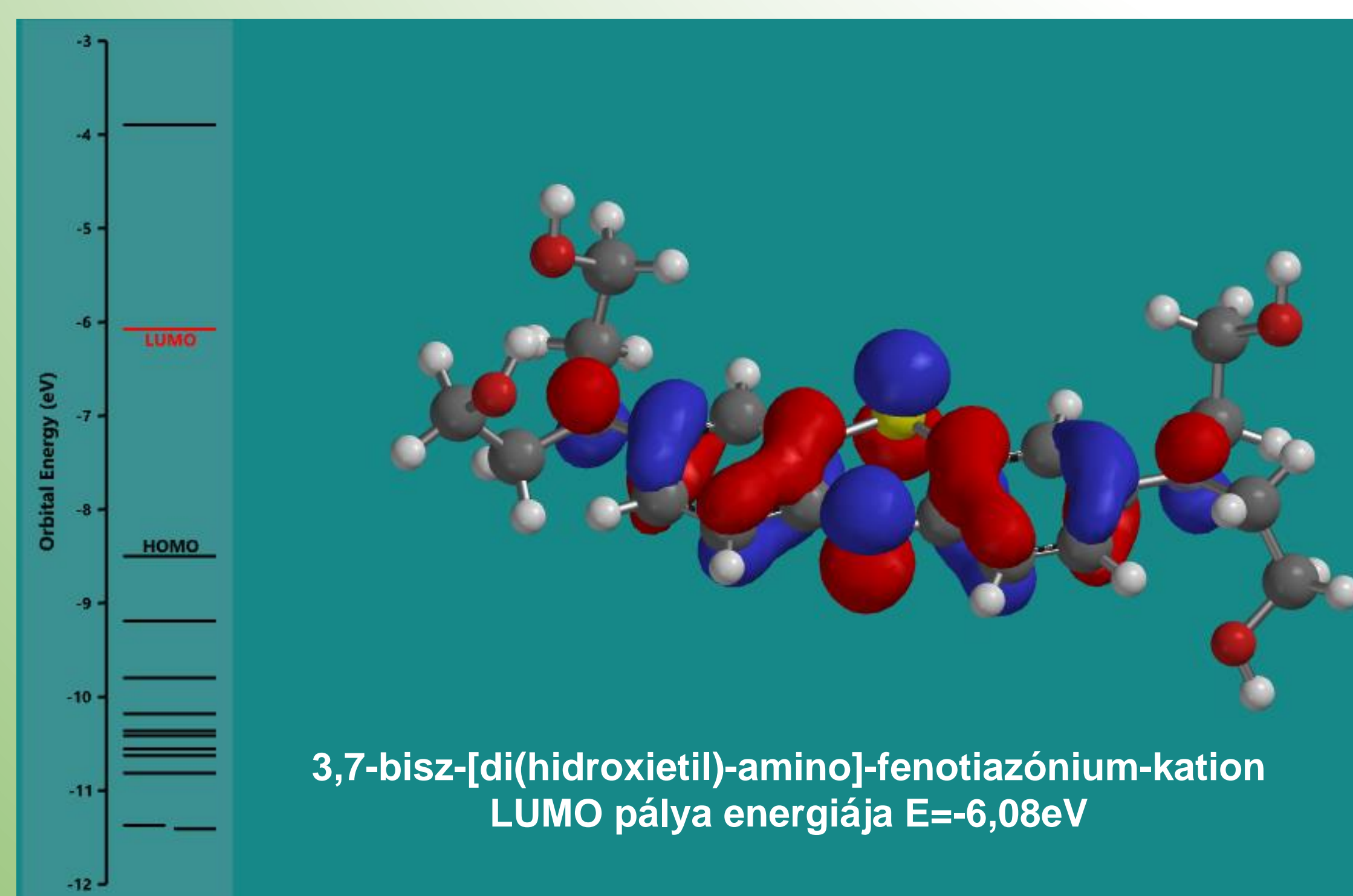
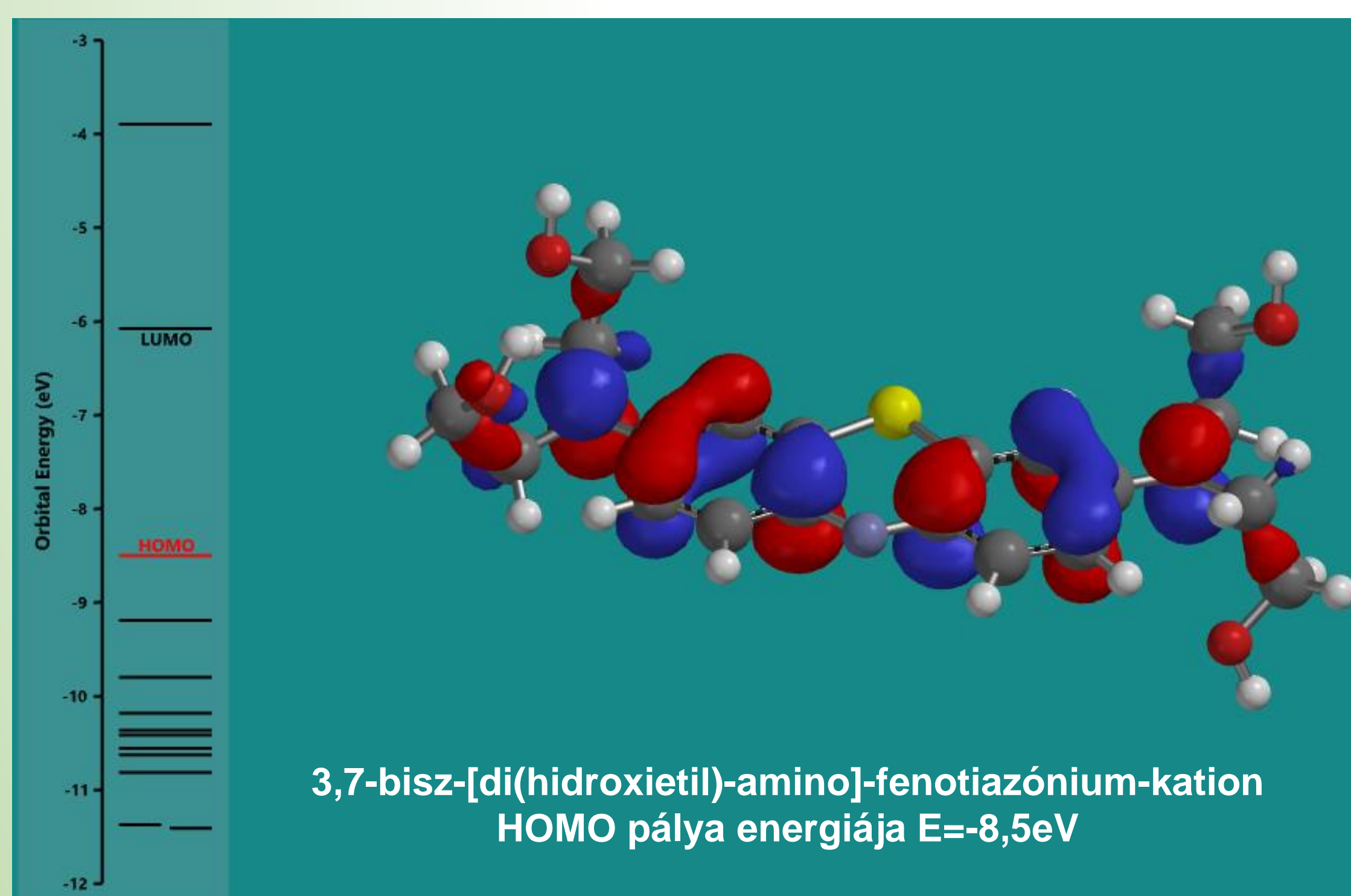
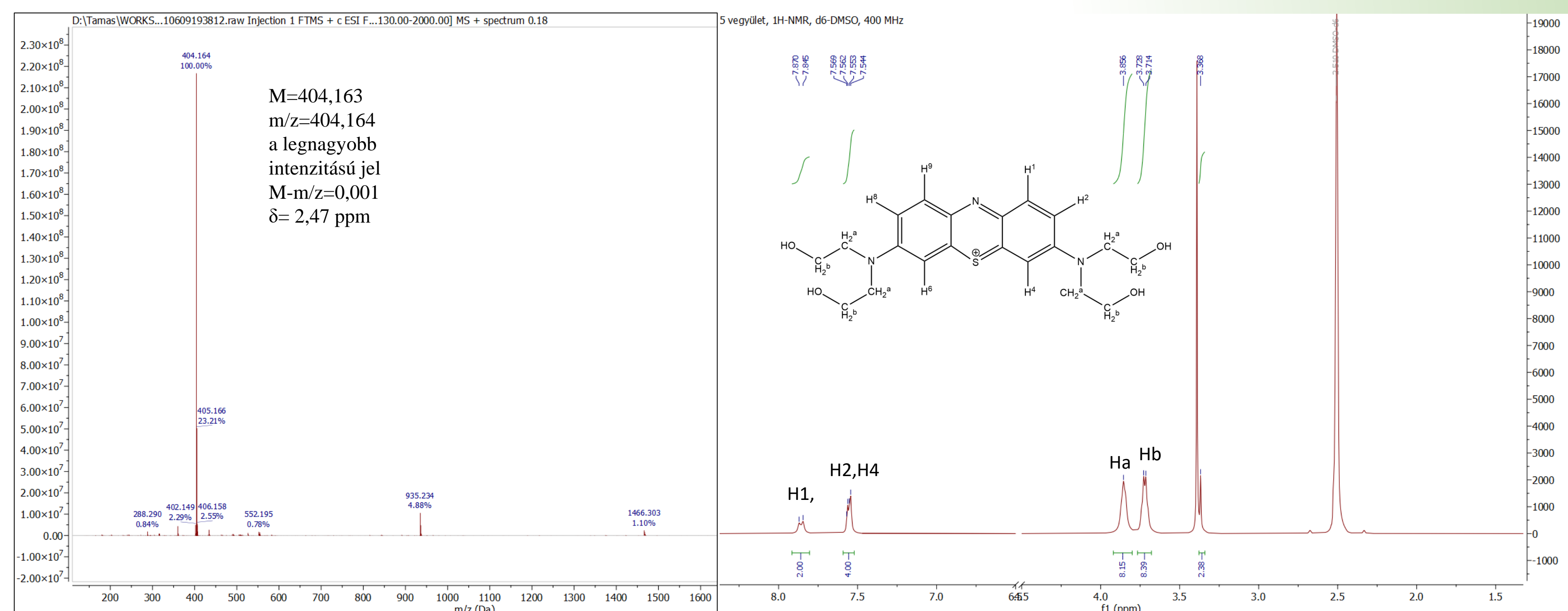
Az 1-5 molekulák HOMO és LUMO pályának energiái és a számolt energiaszintkülönbségek

Sorszám	Konformer neve	Energia (kJ/mol)	E HOMO (eV)	E LUMO (eV)	HOMO-LUMO különbség (eV)	Boltzmann eloszlás
1	M0019	-3705716	-7,46	-6,02	-1,44	1,000
2	M0001	-3518944	-8,62	-6,17	-2,45	1,000
3	M0001	-3907519	-9,24	-7,06	-2,18	0,408
	M0002	-3907519	-9,24	-7,06	-2,18	0,401
	M0003	-3907519	-9,24	-7,06	-2,18	0,191
4	M0001	-3716338	-8,23	-5,96	-2,27	0,24
	M0002	-3716338	-8,23	-5,96	-2,27	0,24
	M0003	-3716338	-8,23	-5,96	-2,27	0,261
	M0004	-3716338	-8,23	-5,96	-2,27	0,26
5	M0001	-4309111	-8,50	-6,08	-2,42	1,000

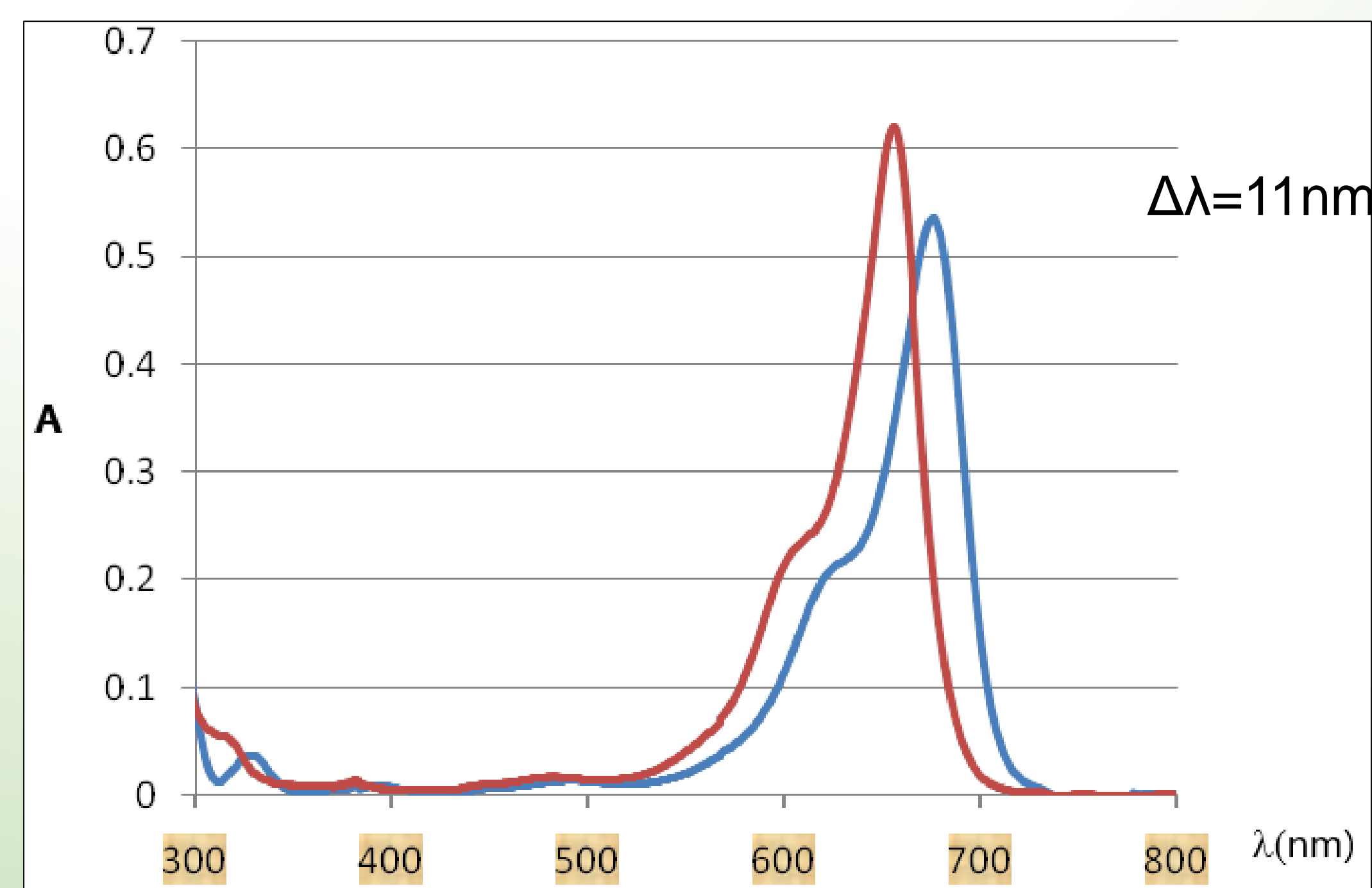
3,7-bisz-[di(hidroxietyl)-amino]-fenotiazónium-5-jodid (5) kétlépcsős szintézise



Az 5-ös vegyület szerkezetének igazolása HRMS és ¹H-NMR spektrumok felhasználásával



Az 5.sz. Metilénkék-analóg szolvatokrómiai viselkedése etanol (piros) és dimetil-szulfoxid (kék) oldószerekben



	DMSO	EtOH
$\lambda(\text{nm})$	676	655
A	0,5359	0,6203
ϵ	33 494	124 000

Szerkezetvizsgálat:
 Az előállított vegyületek szerkezetét a következő spektroszkópiai módszerekkel igazoltuk: ¹H-NMR, ¹³C-NMR, FT-IR, HRMS (ESI), UV-VIS

Műszerek:

Bruker Avance 400 MHz, NMR; Bruker Vector 22 FT-IR; Thermo Scientific LTQ Orbitrap XL HRMS spektrométer; Perkin Lambda 35 UV/VIS spektrofotométer

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

Következtetés

Kutatásunk során előállítottunk egy hidroxilcsoportokat tartalmazó metilénkék-analógot (5), melynek szerkezetét HRMS, FT-IR és NMR spektroszkópiával igazoltuk és optikai tulajdonágait is vizsgáltuk UV-VIS spektroszkópiával. A megfigyelt szolvatokrómia és a hidroxilcsoportok megléte, valamint a modellezéssel nyert adatok alapján, várható hogy az előállított vegyület alkalmas metakrómiás sejtfestésre.