

mgr Joanna Szymczak

„Kompleksy metalowanych ftalocyjanin z podstawnikami L-mentolowymi o potencjalnym zastosowaniu w badaniach biomimetycznych”

Przedmiotem badań była synteza i charakterystyka ftalocyjanin z podstawnikami L-mentolowymi, posiadającymi w centrum koordynacyjnym jony Mg(II), Zn(II), Co(II) oraz bezmetalicznych, a także prekursora do ich otrzymywania. Wyizolowano i scharakteryzowano 11 regioizomerów o różnej symetrii. Ftalocyjaniny magnezowe, cynkowe oraz bezmetaliczne wykazywały symetrię C_4 , C_1 , C_2 , natomiast kobaltowe – C_1 , C_2 . Do oceny symetrii regioizomerów wykorzystano następujące techniki spektroskopii magnetycznego rezonansu jądowego: ^1H NMR, ^{13}C NMR, ^1H - ^1H COSY, ^1H - ^{13}C HSQC, ^1H - ^{13}C HMBC. Dla regioizomerów ftalocyjaniny magnezowej o symetrii C_4 , C_1 , C_2 , zostały wykonane obliczenia całkowitej energii cząsteczki z wykorzystaniem metody DFT.

W odniesieniu do ftalocyjaniny magnezowej o symetrii C_1 , uzyskano monokryształ i określono strukturę krystalograficzną metodą XRD, która odpowiadała grupie przestrzennej $P2_12_12_1$. Wszystkie związki oceniono pod względem wydajności kwantowej generowania tlenu singletowego. Regioizomery ftalocyjaniny cynkowej generowały tlen singletowy z wydajnością większą niż wzorzec. Natomiast największe wydajności kwantowe fluorescencji wykazywały regioizomery z jonami Mg(II).

Dla regioizomerów ftalocyjanin cynkowych C_4 , C_1 , C_2 , charakteryzujących się najwyższą wydajnością kwantową generowania tlenu singletowego, oceniono aktywność przeciwbakteryjną względem bakterii *Staphylococcus aureus*, po uprzednim inkorporowaniu w liposomy. Najkorzystniejsze wyniki uzyskano w przypadku regioizomeru o symetrii C_2 .

Dla makrocykli z jonami magnezu oraz kobaltu wykonano pomiary woltamperometryczne, metodą cyklicznej woltamperometrii (CV) oraz woltamperometrii pulsowo różnicowej (DPV). Wykazano możliwość dwóch jednoelektronowych procesów utleniania i redukcji, które przypisano procesom jednoelektronowym zachodzącym w pierścieniu makrocyklicznym. Natomiast dla regioizomerów ftalocyjanin z jonami Co(II), wykazano możliwość trzech jednoelektronowych procesów utleniania.

Aktywność katalityczną oraz selektywność izomerów ftalocyjanin kobaltowych oceniono na przykładzie reakcji utleniania cykloheksenu. Otrzymano cztery produkty: pochodną epoksydową, cykloheks-2-en-1-ol, cykloheksanon, cykloheks-2-en-1-on oraz powstający z największą wydajnością cykloheks-2-en-1-on (15%).

Aktywność katalityczną regioizomerów ftalocyjanin kobaltowych wobec substancji leczniczych, obserwowano na przykładzie esomeprazolu. Proces utleniania kontrolowano z wykorzystaniem spektrometrii mas. W reakcji prowadzonej z udziałem regioizomeru o symetrii C_2 powstało siedem produktów utleniania esomeprazolu, natomiast w przypadku C_1 – cztery. W oparciu o eksperymentalne wartości m/z, zaproponowano przewidywane produkty esomeprazolu.

3.12.2021r. Joanna Szymczak