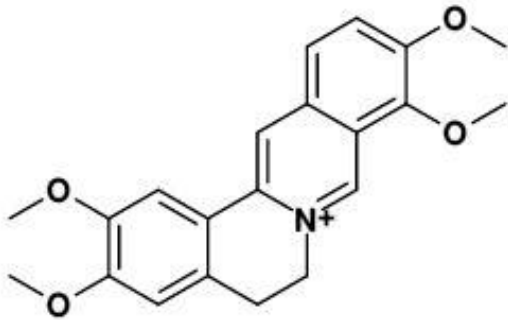


SZUPRAMOLEKULÁK KÉPZŐDÉSÉNEK VIZSGÁLATA FÉNNYEL

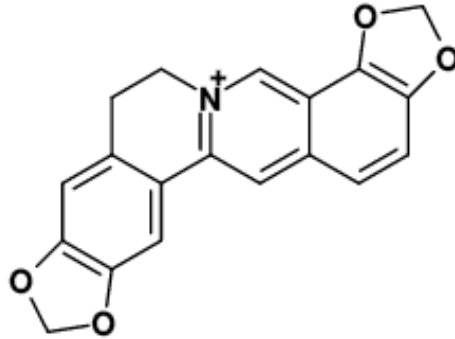
BAGLYAS MÁRTON, PSEG, BONYHÁD

Témavezetőim: Biczók László és Harangozó József

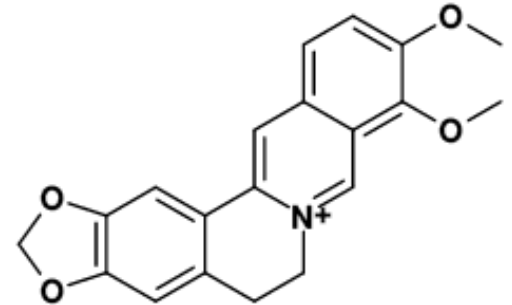
Felhasznált alkaloidok



Palmatine



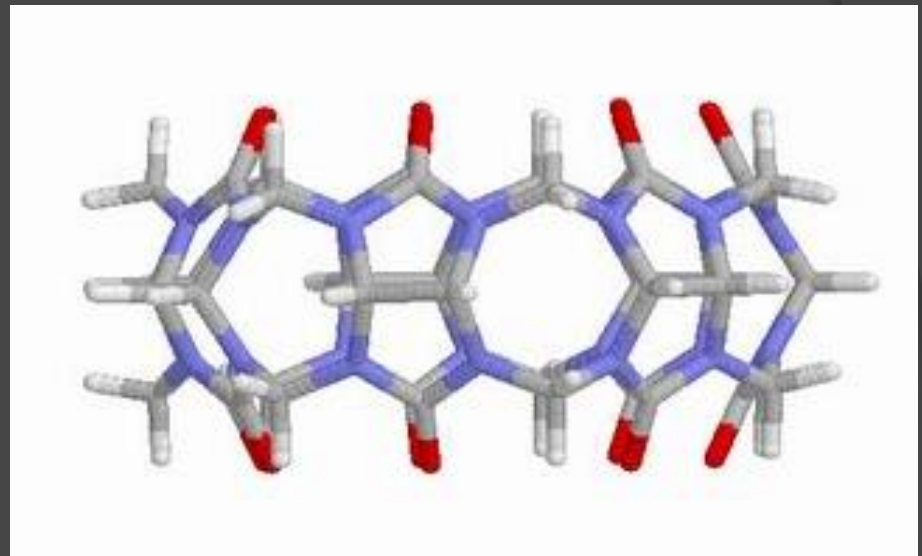
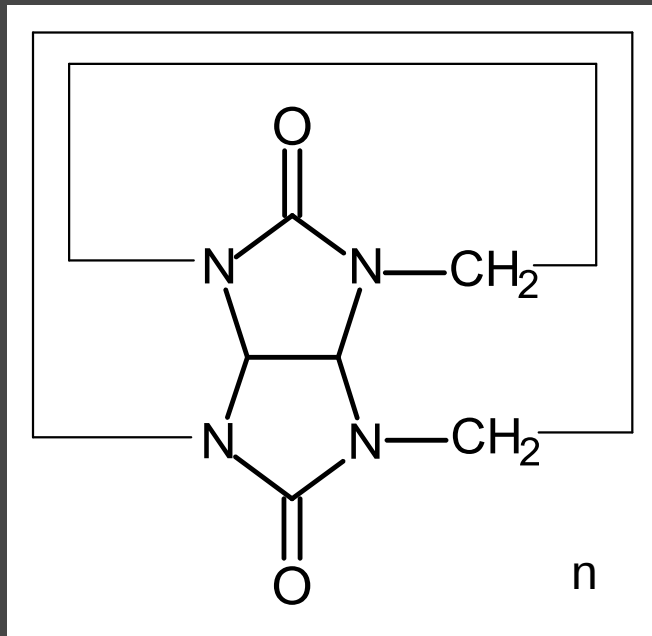
Coptisine



Berberine

- Izokinolinvázás alkaloidok (hasonló szerkezet)
- Gyógyhatású vegyületek (rákellenes, fájdalomcsillapító, gyulladáscsökkentő, gyomorbántalmak kezelése, antibakteriális hatás)
- Természetes forrásból izolálható (növények)

Kukurbit[7]uril (CB7, makrociklus)



- ciklikusan ismétlődő glikoluril egységek, amiket két metilénhíd kapcsol össze
- komplexképződés (aminosavak, festékek, fémionok, szerves kationok)
- negatív töltésű a gyűrű bejárata, a belseje hidrofób
- biokompatibilis hordozó, oldékonyság növelése
- nem mérgező

A kutatómunka céljai

1. Palmatin fotofizikai jellemzése

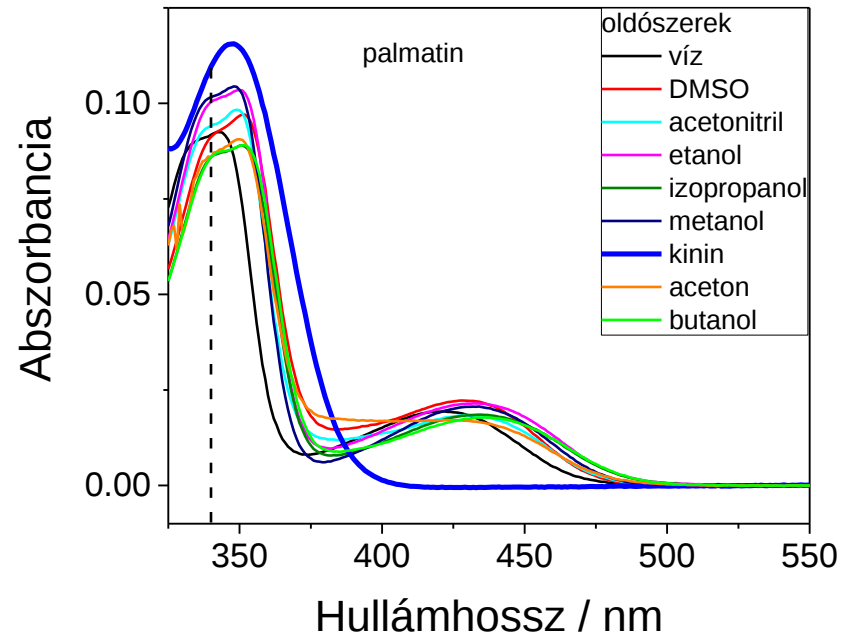
- Oldószerek hatása a fluoreszcenciára -> (oldószerpolaritás)
- Fluoreszcencia élettartam

2. Koptizin kötődése kukurbit[7]urillal

- (titrálás -> fluoreszcencia intenzitás változása)



Palmatin fotofizikája, oldószerhatás

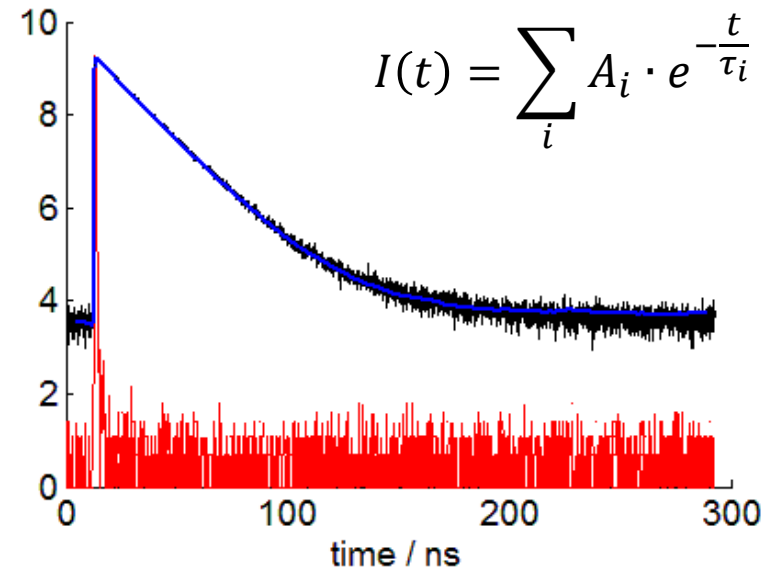
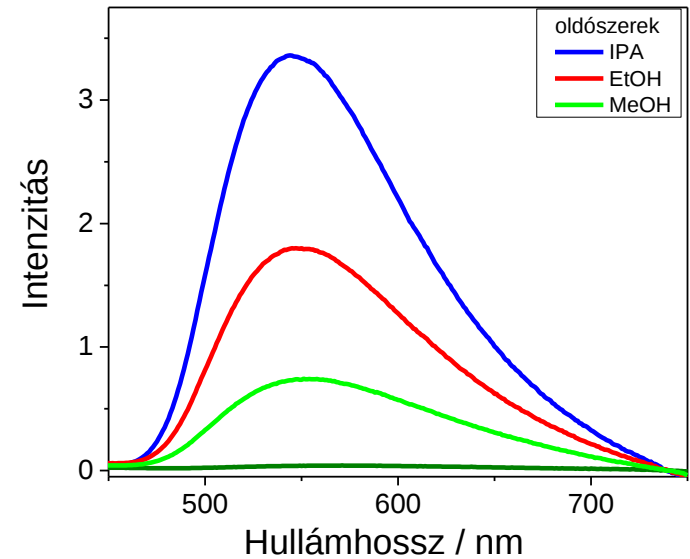


Lambert-Beer-törvény

$$A = \lg \frac{I_0}{I} = \epsilon c l$$

Eltérő polaritású oldószerekben más a fluoreszcencia
Referencia: kinin-szulfát (0.5 M kénsav)

Fluoreszcencia élettartam változása az oldószertől függően



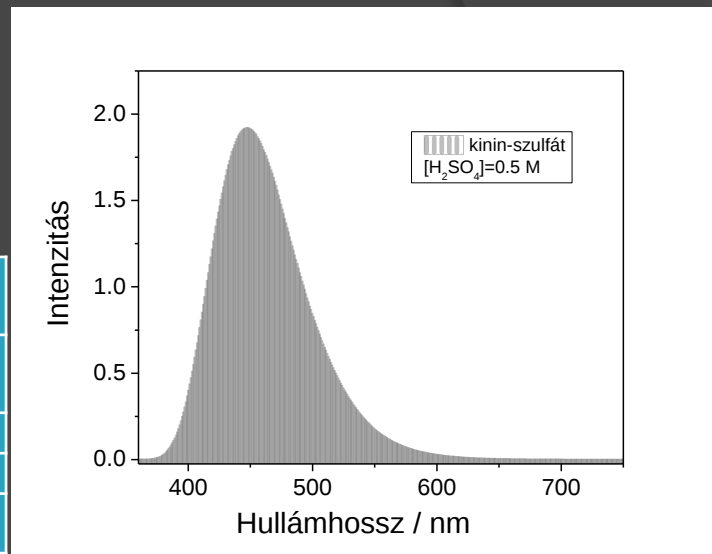
Oldószerhatás, eredmények

Fluoreszcencia kvantumhatásfok (Φ_F):

$$\Phi_F = \frac{k_r^S}{k_r^S + k_{nr}^S} = k_r^S \tau_S$$

$$\frac{\Phi_F}{\Phi_{FR}} = \frac{n^2}{n_R^2} \times \frac{\int_0^\infty I_F(\lambda_E, \lambda_F) d\lambda_F}{\int_0^\infty I_{FR}(\lambda_E, \lambda_F) d\lambda_F} \times \frac{1 - 10^{-A_R(\lambda_E)}}{1 - 10^{-A(\lambda_E)}}$$

oldószer	Φ_F	τ (ns)	$k_r(s^{-1})$	$k_{nr}(s^{-1})$	polaritás (kcal/mol)
kinin-szulfát (kénsav)	0.546	-	-	-	-
aceton	0.009	0.506	1.80E+07	1.96E+09	42.2
butanol	0.031	1.872	1.65E+07	5.18E+08	49.7
DMSO	0.008	0.46	1.73E+07	2.17E+09	45.1
metanol	0.006	0.446	1.28E+07	2.23E+09	51.9
víz	4.43E-04	0.094	4.72E+06	1.06E+10	63.1
acetonitril	0.009	0.402	2.27E+07	2.46E+09	45.6
etanol	0.014	0.614	2.25E+07	1.61E+09	55.4
izopropanol	0.029	1.787	1.62E+07	5.43E+08	48.4



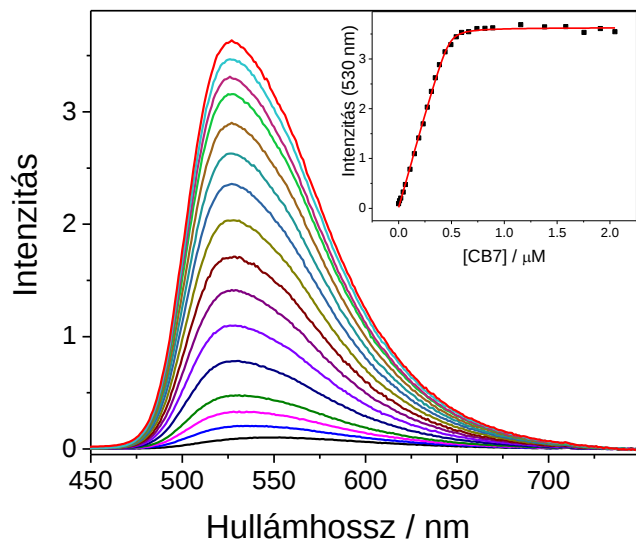
Gerjesztési hullámhossz: 340 nm

Tartomány 360-750 nm

ET 30 skála, szolvatokromizmus
(pyridinium N-phenolate betaine) festék



Koptizin beékelődése a CB7 üregébe



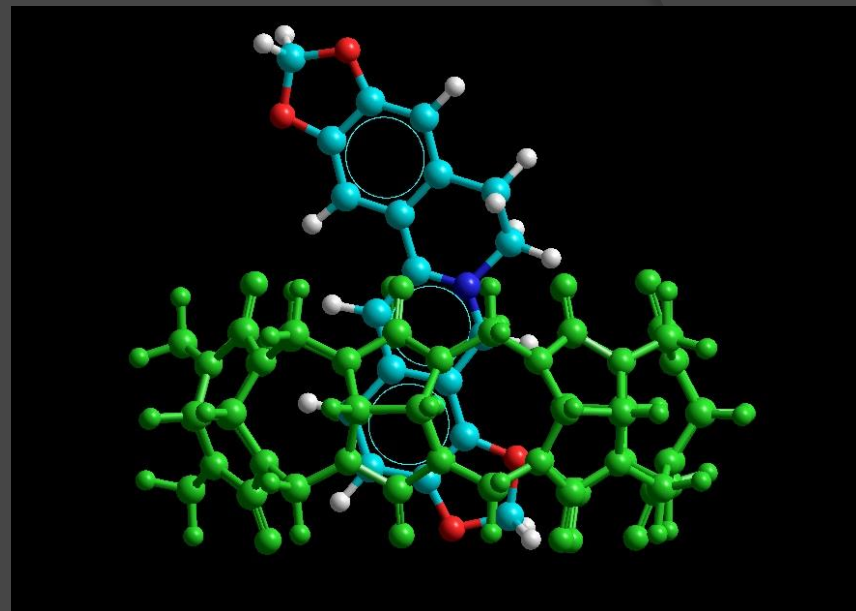
[koptizin] = 2.8×10^{-7} M

1:1 komplex keletkezik

Egyensúlyi állandó

$K = 2 \times 10^7 \text{ M}^{-1}$

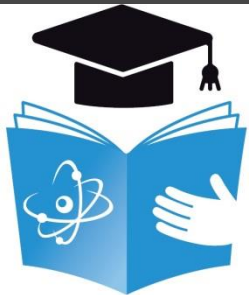
Fluoreszcencia intenzitás nő,
a spektrum eltolódik a kék tartomány felé
(20 nm) a komplex képződése során



Molekula mechanika módszerrel
számolt (Hyperchem program)
szerkezete a komplexnek



Köszönetnyilvánítás



MSMS TUDÁSPONT

