

Učinkovita i ekološki prihvatljivija metoda za precizno ugrađivanje deuterija

Znanstvenici su razvili energetski učinkovitiju te ekološki prihvatljiviju metodu za izmjenu vodikovih atoma u molekulama. Nova metoda ima potencijal primjene u raznim znanstvenim i industrijskim sektorima, od medicine do razvoja novih materijala.

ZAGREB, 22. 11. 2023. - Tim zelenih kemičara s Instituta Ruđer Bošković (IRB) razvio je novu metodu u čvrstom stanju koja omogućuje preciznu izmjenu vodikovih atoma s deuterijem u kompleksnim molekulama. [Ove rezultate](#) objavio je ugledni časopis *Inorganic Chemistry Frontiers* koji spada među deset posto najutjecajnijih časopisa u području anorganske kemije.

Molekule su poput sitnih, kompleksnih strojeva sastavljenih od još sitnijih dijelova, odnosno atoma. Atomi i molekule tvore sve što vidimo oko sebe, od vode do plastike. Molekule se ponekad mogu poboljšati ili im se mogu dati nova svojstva zamjenom određenih atoma unutar njih. Znanstvenici to rade kako bi, primjerice, dobili nove materijale ili lijekove s boljim, naprednijim svojstvima.

Tim s Ruđera razvio je novu metodu koja omogućava zamjenu atoma vodika u određenim organskim molekulama s njihovom "težom varijantom" odnosno, s atomima deuterija.

Deuterij je izotop vodika, a selektivna zamjena vodika deuterijem daje specifične verzije molekula koje imaju različita fizikalna, kemijska ili biološka svojstva. Konkretno, deuterij, kad se ugradi u lijekove, može poboljšati njihovu učinkovitost. Ova tehnika dobila je na značaju nakon odobrenja prvog deuteriranog lijeka 2019. godine, koji se koristi u tretmanu Huntingtonove bolesti. Uvođenje deuterija u molekule lijeka otvara nove mogućnosti za razvoj terapija s, primjerice, manje nuspojava.

Kako bi proveli deuteriranje, znanstvenici su koristili molekule s ugrađenim paladijem. U ovoj reakciji paladij je poput molekularnog nadzornika, koji usmjerava atome deuterija tamo gdje trebaju ići.

Reakciju su postigli u čvrstom stanju, što znači da se stvari nisu otapale da bi reagirale. To ovaj proces čini čistim i ekološki prihvatljivijim. Štoviše, cijeli proces se odvija na sobnoj temperaturi, upravo zahvaljujući primjeni metoda mehanokemije u kojim se reakcije odvijaju u čvrstom stanju, za razliku od nekih tradicionalnih postupaka koji uključuju otapala, prekidanje reakcija, te zahtijevaju puno energije, obično u obliku topline.

"Korištenjem paladija za aktivaciju specifičnih veza u molekulama, a zatim primjenjujući ranije razvijene metode, uspjeli smo selektivno zamijeniti vodik deuterijem. Kao izvor deuterija poslužio nam je lako dostupan L-cistein. Naime, L-cistein je aminokiselina koju prirodno nalazimo u raznim biljnim i životinjskim proteinima. Može se proizvoditi industrijski, ili izolirati iz prirodnih izvora, što ga čini dostupnim za upotrebu u laboratorijskim i industrijskim procesima.

Čitav smo postupak proveli u čvrstom stanju bez upotrebe otapala te smo detaljno pratili i analizirali reakcije uz pomoć Ramanove spektroskopije. Također, da bi bolje razumjeli proces, koristili smo kvantno-kemijske izračune. Podaci koje smo dobili dali su nam cjelovitu i detaljnu sliku procesa deuteriranja." objašnjava dr. sc. **Marina Juribašić Kulcsár**, dopisna autorica na radu.

Istraživanje ne samo da pokazuje da su ovakve molekularne manipulacije moguće u čvrstom stanju, već otvara vrata za izvođenje ovih vrsta zamjena atoma na širokom spektru organskih spojeva, što bi moglo naći primjenu u znanosti i industriji, posebice u proizvodnji lijekova i novih materijala.

Iza ovih sjajnih rezultata stoji tim znanstvenika Laboratorija za sintezu i katalizu u čvrstom stanju Zavoda za fizičku kemiju IRB-a koji, uz dopisne autore na radu dr. sc. **Marinu Juribašić Kulcsár** i

dr. sc. **Stipu Lukina**, čine i dr. sc. **Alen Bjelopetrović**, dr. sc. **Dajana Barišić**, dr. sc. **Ivan Halasz** i dr. sc. **Manda Ćurić**.

Istraživanje je ostvareno u skupu istraživačkih projekata **Hrvatske zaklade za znanost** "Mehanokemijska aktivacija i funkcionalizacija veze C–H potaknuta paladijem i usmjerena ligandom (*MechFunChem*)" i "Sistematika mehanizama u bezotopinskoj ili tekućinski kataliziranoj sintezi u čvrstom stanju (*SystForSynt*)".

POVEZNICA NA RAD:

Deuteration of Pd-activated C(sp²)-H bonds in the solid state, *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2023, Volume 10, Issue 20, pages 6005-6014. (<https://doi.org/10.1039/D3QI00932G>)