

5-izociano-1-oktiloxinaftalin szolvatokróm tulajdonságainak vizsgálata

Study of solvatochromic properties of 5-isocyano-1-(octyloxy)naphthalene

MEITERT Zsuzsanna^{1,2}, ADAMOCZKY Anita^{1,2}, Dr. NAGY Tibor¹, FEHÉR Péter Pál³, PARDI-TÓTH Veronika^{1,2}, Dr. KUKI Ákos¹, Dr. NAGY Lajos¹, Dr. ZSUGA Miklós¹, Dr. KÉKI Sándor¹

¹ Alkalmazott Kémiai Tanszék, Természettudományi és Technológiai Kar
Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország

² Kémiai Tudományok Doktori Iskola

Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország

³ Magyar Tudományos Akadémia

Magyar Tudósok Körútja 2, H-1117 Budapest, Magyarország

ABSTRACT

Fluorescent dyes with solvatochromic effect are widely studied molecules since they can be applied as sensors in biological systems. Thus the synthesis and characterization of a novel fluorophore, 5-isocyano-1-(octyloxy)naphthalene (ICON) were carried out. The solvatochromic property was investigated in various solvents from toluene to dimethyl-sulfoxide. Moderate Stokes shift was obtained in the range from 3595 cm⁻¹ to 5675 cm⁻¹. For further evaluation, the Lippert-Mataga and Bilot-Kawski methods were applied, and the ground state, excited state dipole moments and their differences were calculated. In addition, TD-DFT calculations were carried out to support our findings.

Keywords: 5-isocyano-1-(octyloxy)-naphthalene, fluorescence, solvatochrome

KIVONAT

A szolvatokróm hatású fluoreszcenz festékeket kiterjedten tanulmányozzák, mivel szenzorként is alkalmazhatók akár biológiai rendszerekben is. Új fluorofór 5-izociano-1-oktiloxinaftalin (ICON) szintézisét és karakterizálását végeztük el. A szolvatokróm tulajdonságot különböző oldószerekben, toluoltól indulva dimetil-szulfoxidig vizsgáltuk. A minta közepes Stokes eltolódást mutatott 3595 - 5675 cm⁻¹-es tartományban. További értékeléshez a Lippert-Mataga és Bilot Kawski módszereket használtuk, valamint az alap- és gerjesztett állapothoz tartozó dipólusmomentumot és azok közötti eltéréseket is kiszámoltuk. A feltevéseink igazolásához TD-DFT számításokat végeztünk.

Kulcsszavak: 5-izociano-1-oktiloxi-naftalin, fluoreszcencia, szolvatokróm

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük az alábbi pályázatok munkánkban nyújtott anyagi támogatását: NKFI K-132685, K-132236, TKP-2021NKTA-34.