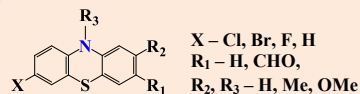
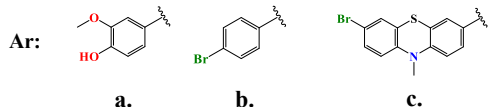
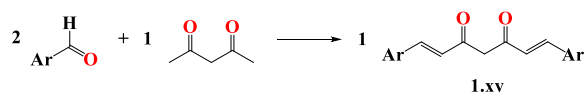


KIVONAT

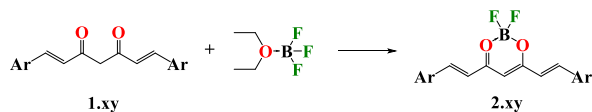
A fenotiazin merev szerkezetű, nagy π -konjugációval rendelkező molekula, amely a központi gyűrűben lévő, elektronban gazdag nitrogén és kén jelenlétének köszönhetően erős elektron küldő tulajdonsággal rendelkezik. Továbbá annak köszönhetően, hogy a molekula több pozícióban is funkcionálizálható, fotofizikai tulajdonságai jól változtathatóak.^[2]



SZINTÉZIS



1. séma. Kurkuminoidok előállítása.



2. séma. Kurkuminoid-bórkomplexelek előállítása.

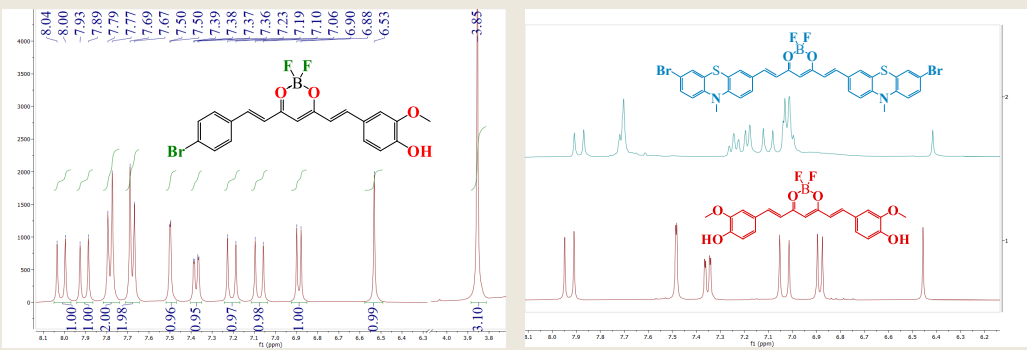
CÉLOK

A fenotiazin és a kurkumin jó fotofizikai tulajdonságait ötvözve, a fenotiazin alapú kurkumin származékok potenciális fotszenszibilizátoraként használhatóak a DSSC harmadik generációs napelemekben. A kutatás célja ezen vegyületek előállítás, valamint fotofizikai tulajdonságuk vizsgálata.

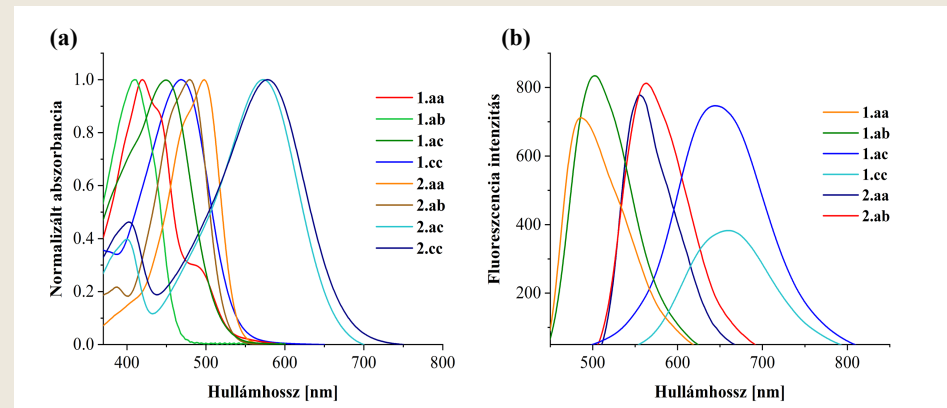
MŰSZEREK

- Bruker NMR 400, 600 MHz spektrométer
- Perkin Elmer Lambda 35 UV-Vis spektrofotométer
- Perkin Elmer LS 55 fluoreszcencia spektrofotométer
- LTQ Thermo Scientific HRMS-tömegspektrométer

SZERKEZETELEMZÉS



FOTOFIZIKAI TULAJDONSÁGOK TANULMÁNYOZÁSA



3. ábra. Az előállított vegyületek abszorpciós és emissziós spektrumai.

- (a) DCM, $\sim 10^{-3}$ M
(b) DCM, $\sim 10^{-7}$ M

TÁBLÁZATOK

1. táblázat. Az előállított vegyületek termelése tisztítás után

Vegyület	η [%]	Vegyület	η [%]
1.aa	90	2.aa	74
1.ab	56	2.ab	78
1.ac	34	2.ac	83
1.cc	74	2.cc	69

(1.a – 1.b) – B₂O₃, Tributyl-borát, n-butilamin, EtOAc, HCl, 15 h, 70 °C
(2.a – 2.b) – Et₂O, diklór-metán, 10 h, 0-5 °C

2. táblázat. Az előállított vegyületek mért és számolt fotofizikai adatai

Vegyület	λ_{absz} [nm]	ϵ [L·mol ⁻¹ ·cm ⁻¹]	λ_{em} [nm]	Stokes-eltolódás [cm ⁻¹]
1.aa	420	37204	486	3233
1.ab	410	40287	503	4510
1.ac	450	44776	645	6718
1.cc	469	88639	660	6170
2.aa	498	40091	555	2062
2.ab	479	73715	563	3115
2.ac	401	573	-	-
2.cc	403	579	16544	-

KÖVETKEZTETÉSEK

Az előállított fenotiazin alapú kurkumin származékok emissziója a vártnál kisebb intenzitással rendelkeznek, ezért ezen vegyületek fotszenszibilizátorként alkalmazhatóak.

A kurkuminoidok bórral történő komplexálása során a vegyületek planáris szerkezetűek lesznek, így az enol forma stabilizálódik, ami bathokróm eltolódásban nyilvánul meg az abszorpciós és emissziós spektrumokban.^[1]

TOVÁBBI CÉLOK

További céljaink közé tartozik, olyan nem szimmetrikusan szubsztituált fenotiazin alapú kurkumin analógok szintézise, amelyek fotofizikai tulajdonságai (emisszió növelése) D-A-D szerkezetek kialakításával javíthatóak, illetve napcellákban történő alkalmazásuk tesztelése ITO és FTO hordozókon.

[1], Peni, P., Sasri, R., & Silalahi, L. H. Synthesis of Metal-Curcumin Complex Compounds (M = Na⁺, Mg²⁺, Cu²⁺). Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi, 23(3), 75-82. (2020)

[2], Gál, E.; Nagy, L. C., Photophysical Properties and Electronic Structure of Symmetrical Curcumin Analogues and Their BF₂ Complexes, Including a Phenothiazine Substituted Derivative. Symmetry, 13 (12), (2021)