

# Szimmetrikus kurkumin analógok BF<sub>2</sub>-komplexeinek a fotofizikai tulajdonságainak a tanulmányozása a DFT elmélettel alátámasztva

VASS Dávid-József\*, GÁL Emese, NAGY Levente-Csaba

Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár, RO-400028, Arany János u. 11.  
david.vass@stud.ubbcluj.ro

## A kurkuminok BF<sub>2</sub>-komplexei

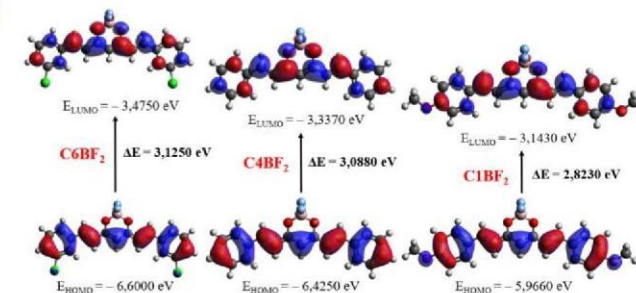
A kurkuminoidok bórral stabil komplexet képeznek. A kurkuminok BF<sub>2</sub>-komplexei kiterjedt konjugált rendszerrel rendelkeznek, ami jelentős fotofizikai tulajdonságokat kölcsönöz. A komplexekben a ligandum poli-aromás telítetlen lánca, illetve a molekula centrumában található BF<sub>2</sub>-kelát a kromofor csoport, aminek az elnyelését az aromás gyűrűkön található auxokrom csoportok befolyásolják.

## Szerkezetvizsgálat



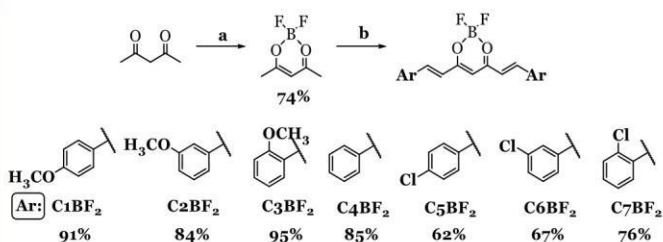
2. ábra: a szubsztituensek elektronküldő effektusának hatása a mezo-helyzetű CH-csoport eltolódására <sup>1</sup>H NMR spektrumban.

## Szubsztituens- és oldószerhatás



3. ábra: az auxokrom csoportok hatása a HOMO és a LUMO pályák energiakülönbségére.

## Szintézis



1. ábra: a BF<sub>2</sub>-komplexek szintézise.

a: 1 ekv. ACAC, 1 ekv. BF<sub>3</sub>·Et<sub>2</sub>O, DCM, r.t.

b: 1 ekv. ACACBF<sub>2</sub>, 2 ekv. aromás aldehid, 1 ekv. BuNH<sub>2</sub>, B(OBu)<sub>3</sub>, EtOAc, r.t.

## Irodalmi hivatkozás

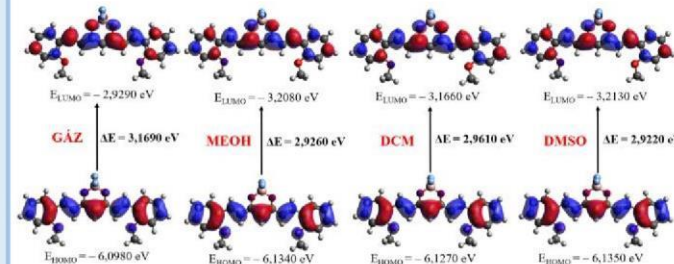
E. GÁL, L.Cs. NAGY, Photophysical properties and electronic structure of symmetrical curcumin analogues and their BF<sub>2</sub> complexes, including a phenothiazine substituted derivative. *Symmetry*, **2021**, 13.12: 2299.

Anyagok	Oldószer	λ <sub>abs</sub>	λ <sub>em</sub>	Stokes eltolódások
		nm	nm	cm <sup>-1</sup>
C <sub>1</sub> BF <sub>2</sub>	DMSO	393, <b>498</b>	553	51496
C <sub>4</sub> BF <sub>2</sub>		433, <b>458</b>	485, 491	60686
C <sub>6</sub> BF <sub>2</sub>		428, <b>453</b>	473	48787

1. táblázat: az auxokrom csoportok elektronküldő effektusának hatása a komplexek fényelnyelésére.

Komplex	Oldószer	λ <sub>abs</sub>	λ <sub>em</sub>	Stokes eltolódások
		nm	nm	cm <sup>-1</sup>
C <sub>3</sub> BF <sub>2</sub>	toluol	453, 474	520	33544
	DCM	458, <b>474</b>	526	37910
	DMSO	486	550	39372
	MeOH	455, <b>469</b>	534	31405

2. táblázat: az oldószer hatása a C<sub>3</sub>BF<sub>2</sub> komplex fényelnyelésére.



4. ábra: az oldószerek hatása a C<sub>3</sub>BF<sub>2</sub> komplex HOMO és LUMO pályáinak az energiájára.

## Következtetések

Az auxokrom csoportok és az oldószerek a molekulapályák energiájára gyakorolnak hatást. Mivel a HOMO és LUMO pályák energiája nem azonos értékkel változik, ez azt eredményezi, hogy az átmenethez szükséges energia megváltozik, ami megváltoztatja a gerjesztési és emissziós maximumot.