

NIR fluoreszcens szerves festékek szintézise és fotofizikai vizsgálata

The synthesis and photophysical investigation of NIR-fluorescent organic Dyes

HEGEDÜS Balázs, BRÉM Balázs, GÁL Emese

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Magyar Kémia és Vegyész-mérnöki Intézet
RO-400028, Kolozsvár, Arany János utca 11
balazs.hegedus@stud.ubbcluj.ro

ABSTRACT

Since their discovery in the late 1970's, derivatives of diketopyrrolo[3,4-c]pyrroles (DPPs) have attracted increasing research interest. Due to the combined effect of the two amide groups in the condensed lactam core, DPPs are excellent electron-acceptor ligands¹. In the first step of my work, I selected an N-alkylated DPP derivative that contains thiophene rings at the 3,6-positions and subjected it to various cross-coupling reactions. The reagents used in the coupling reactions, along with the DPP, were halogenated aromatic compounds with good electron-donating properties. According to the literature, the direct arylation can occur on both thiophene rings of the base molecule², however, the results show that the product mixture contains the bis-substituted form of the starting compound in very low amounts or almost not at all. The structures of the isolated products were confirmed using NMR (1D and 2D) and HRMS measurements, and their solvatochromic properties were investigated. The samples exhibited moderate Stokes shifts.

Keywords: diketopyrrolo[3,4-c]pyrrol, direct arylation, fluorescence, solvatochromism,

ÖSSZEFOGLALÓ

A diketo-pirrol[3,4-c]pirrol (DPP-k) származékai az 1970-es évek végén történt felfedezésük óta egyre nagyobb kutatási érdeklődést mutattak. A kondenzált laktám vázban levő két amid csoport együttes hatása miatt a DPP-k jó elektron-akceptor ligandumok¹. A munkám során első lépésben kiválasztottam egy N-alkilezett DPP származékot, amely 3,6-pozícióban tiofén gyűrűket tartalmaz, majd különböző keresztkapcsolási reakcióknak vettem alá. A kapcsolási reakciókban a DPP mellett alkalmazott reagensek minden esetben halogénezett, jó elektronküldő tulajdonságokkal rendelkező aromás vegyületek voltak. A szakirodalom szerint az alaplakula mindkét tiofén gyűrűjén végbe mehet a fentebb említett direkt arilezés², viszont az eredmények azt mutatják, hogy a termékegy nagyon kis mértékben vagy szinte egyáltalán nem tartalmazza a kiindulási vegyület bi-szubsztituált formáját. Az izolált termékek szerkezetét NMR (1D és 2D) és HRMS mérésekkel igazoltam, majd szolvatokróm tulajdonságaikat vizsgáltam. A minták közepes Stokes eltolódást mutattak.

Kulcsszavak: diketo-pirrol[3,4-c]pirrol, direkt arilezés, fluoreszcencia, szolvatokróm

Könyvészet

[1.] A. Abhervé, M. M. Talamo, S. Boi, V. Poupard, F. Gendron, B. Le Guennic, N. Avarvari, F. Pop Inorg Chem 2021 60, 7351–7363.

[2.] L. Chen, J. Roger, C. Bruneau, P. H. Dixneuf, H. Doucet, Adv. Synth. Catal. 2011 353, 2749–2760.