Közeli infravörös tartományban emittáló, *mezo*-helyzetben szubsztituált heptametin-cianin festékek: a szintézistől a fotofizikáig

Near-Infrared-Emitting Meso-Substituted Heptamethine. Cyanine Dyes: From the Synthesis to Photophysics

BRÉM Balázs, GÁL Emese, GĂINĂ Ioana-Luiza

Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet,
Kolozsvár, Arany János utca, 11,
balazs.brem@ubbcluj.ro

ABSTRACT

Cyanine dyes are a class of functional organic dyes characterized by a π-conjugated poly-methinic chain linking two heterocyclic ring systems. These dyes are widely recognized for their versatile applications across industrial and technological fields, including photosensitization and optical materials and biological labeling.

Heptamethine cyanine dyes were synthesized in good yields by the reaction between quaternary indoles and a pentamethinic salt, under mild reaction conditions. These compounds were used as precursors to prepare *meso*-substituted derivatives. The cyanine dye precursors presented UV-Vis absorption, related to fully allowed electronic transitions and fluorescence emission in the NIR region, without any evidence of aggregation in both ground and excited states. The substitution at the meso position showed a fundamental role in their photophysics.

Keywords: Cyanine dyes, Synthesis, NIR region

ÖSSZEFOGLALÓ

A cianinfestékek a funkcionális szerves festékek azon csoportját alkotják, amelyet két heterociklusos gyűrűrendszert összekötő, π-konjugált polimetinlánc köt össze. Ezek a festékek széles körben ismertek sokoldalú ipari és technológiai alkalmazásaikról, ideértve a fényérzékenyítést és az optikai anyagokat és biológiai jelölést.

A heptametin-cianinfestékeket jó hozammal állítottuk elő kvaterner indolok és egy pentametinsó reakciójával, enyhe reakciókörülmények között. Ezeket a vegyületeket prekurzorként használtuk fel *mezo*-helyzetben szubsztituált származékok előállítására. A cianinfestékek a teljesen megengedett elektronátmenetekhez köthető UV-Vis abszorpciót, valamint közeli infravörös (NIR) tartományba eső fluoreszcens emissziót mutattak, anélkül, hogy alap- vagy gerjesztett állapotban aggregációra utaló jelek mutatkoztak volna. A *mezo*-helyzetű szubsztitúció alapvető szerepet játszott a vegyületek fotofizikai tulajdonságaiban.

Kulcsszavak: Cianinfestékek, szintézis, NIR-tartomány

Acknowledgements: This work was supported by grants from UBB by AGC33593/19.08.2026 , AGC33595/19.08.2026.