

Szimmetrikusan szubsztituált kurkumin analógok és ezek BF₂ komplexeinek szintézise, fotofizikai tulajdonságaik és TD/DFT tanulmányozása

Synthesis, photophysical properties and electronic structure of symmetrical substituted curcumin analogues and their BF₂ complexes

GÁL Emese¹, NAGY Levente Csaba¹

¹ Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki kar,
Arany János utca, 11 szám, Kolozsvár, 400028, Románia
emese.gal@ubbcluj.ro

ABSTRACT

Symmetrically substituted curcumin analogues, compounds with electron donor moieties at both ends of the conjugated systems, and their difluoroboron complexes were synthesized, and their structures were fully characterized. Complexation with BF₂ resulted a bathochromic shift both in the absorption and emission spectra, indicating that the π -conjugation was more extended than the one in the initial compounds. The solvatochromic effect were studied, in case of phenothiazinyl-curcumin BF₂ complex was the most notably. A novel compound with enhanced photophysical properties, bearing phenothiazine moieties, is reported. Theoretical study of the investigated compounds was carried out using DFT and TD-DFT methods to evaluate the ground state geometry and vertical excitation.

Keywords: BF₂-curcumin; phenothiazine; solvatochromism; DFT/TD-DFT; fluorescence

ÖSSZEFOGLALÓ

Szimmetrikusan szubsztituált kurkumin származékok, a konjugált rendszer mindkét végén elektronküldő egységeket/ csoportokat tartalmazó, valamint ezek bórdifluoriddal képzett komplexeinek a szintézise és szerkezetanalízisét valósítottuk meg. A BF₂-al beépülése a molekulába, a vegyületek úgy az abszorpciós mint az emissziós spektrumában batokróm eltolodást idéz elő, ami a vegyület kiterjedtebb π -konjugációjára utal, a kiindulási vegyülethez képest. A szolvatokrómia hatása a fenotiazinil-kurkumin bórdifluorid komplex esetén volt a legjelentősebb. Az előállított vegyületek optikai tulajdonságait elméleti számításokkal igazoltuk, DFT és TD-DFT módszereket alkalmazva.

Kulcsszavak: BF₂-ckurkumin komplex; fenotiazin; szolvatokrómia; DFT/TD-DFT; fluoreszcencia