

Zn(II)–ftalocianinok fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata UV–Vis spektroszkópiával és molekulamodellezéssel

Photophysical characterization of Zn(II)–phthalocyanines using UV–Vis spectroscopy and molecular modelling

KIRÁLY Arnold, Dr. LOVÁSZ Tamás, Dr. KUN Attila-Zsolt

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Magyar Kémiai és Vegyészmérnöki Intézet, Arany János utca 11 szám, 400028 Kolozsvár, Románia,
Email: kiralyarni@gmail.com

ABSTRACT

In this study, we evaluated the photophysical properties of Zn(II)–phthalocyanines, that are newly used in photodynamic therapy as photosensitizers. Phthalocyanines are very stable, synthetic aromatic compounds with a ring system composed by 18 π electrons. They can form metal complexes, that are an important class of dyes. Traditional uses of phthalocyanine dyes are as: blue and green pigments for automotive paints and printing inks. In biology, water soluble phthalocyanines are used in tissue and cell staining. During our research we have investigated several Zn(II)–phthalocyanine derivatives by UV-Vis spectroscopy. We found two characteristic peaks and the tendency of the molecules to form aggregates. We have used DFT method with B3LYP functional to calculate the HOMO–LUMO gaps to find a correlation between optical properties and structural layout.

ÖSSZEFOGLALÓ

A ftalocianinok nagyon stabil, tetrapirrol gyűrűkből felépülő szintetikus, makrociklusos, aromás vegyületek. A makrociklusos vázhoz kapcsolódó funkciós csoportok, valamint a makrociklus üregébe komplexálódott fém atom, befolyásolja a molekula optikai tulajdonságait, ezért az átmenetifém által komplexált vegyületek különböző színűek és festékként alkalmazzák őket. A vízoldható ftalocianinok a biológiában sejtfestésre használhatóak de elterjedtek a rákterápiában is mint fényérzékenyítő anyagok. A kutatás során előállítottunk majd UV-Vis spektroszkópiás eljárással vizsgáltunk több Zn(II)–ftalocianint, amely során a molekulák aggregátum képzésre való hajlamát is megfigyeltük. A vizsgált molekulákat DFT módszer segítségével, a B3LYP funkcionál 6-31G* Pople-féle báziskészlet használatával modelleztük, meghatároztuk a HOMO–LUMO energiaszintkülönbségeket és összefüggést kerestünk a szerkezet és optikai tulajdonságok között.

Kulcsszavak: ftalocianin, UV–Vis spektroszkópia, molekulamodellezés, sejtfestés, aggregáció

Köszönetnyilvánítás: Köszönjük a CNCS-UEFISCDI, PN-III-P4-PCCF-2016-0142 pályázatnak a kutatómunka anyagi támogatását.