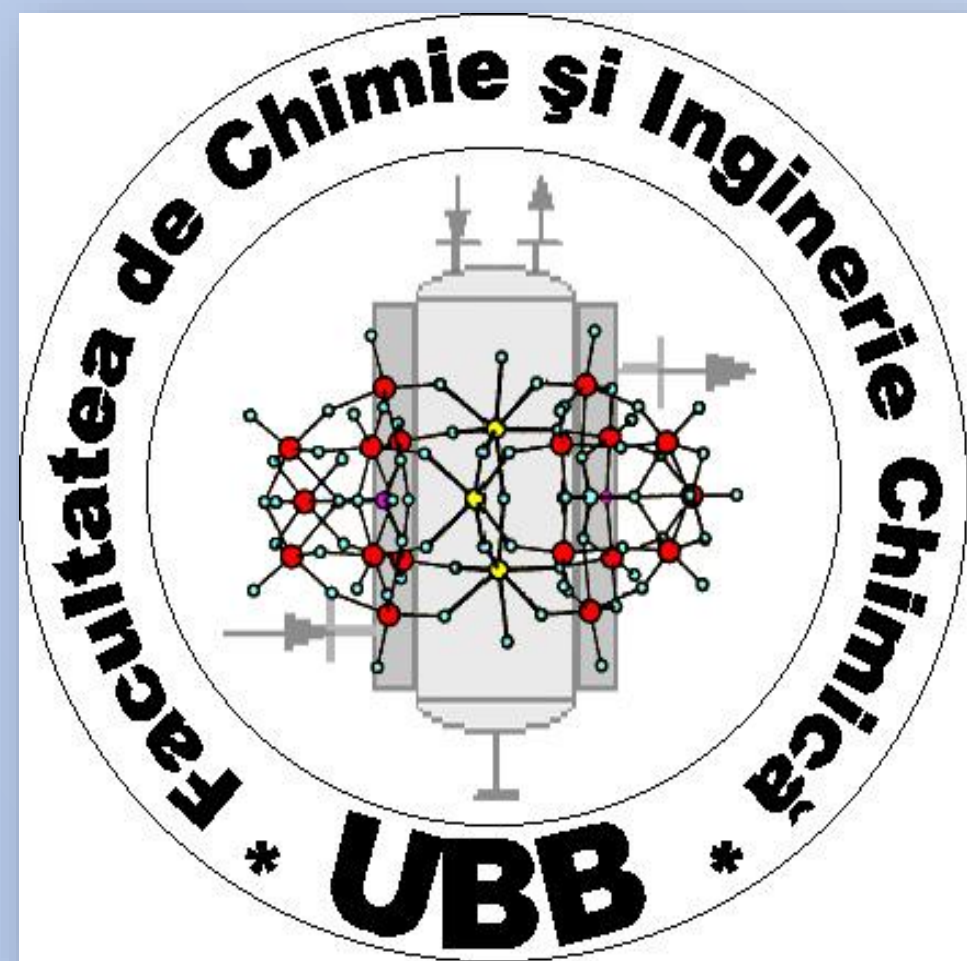


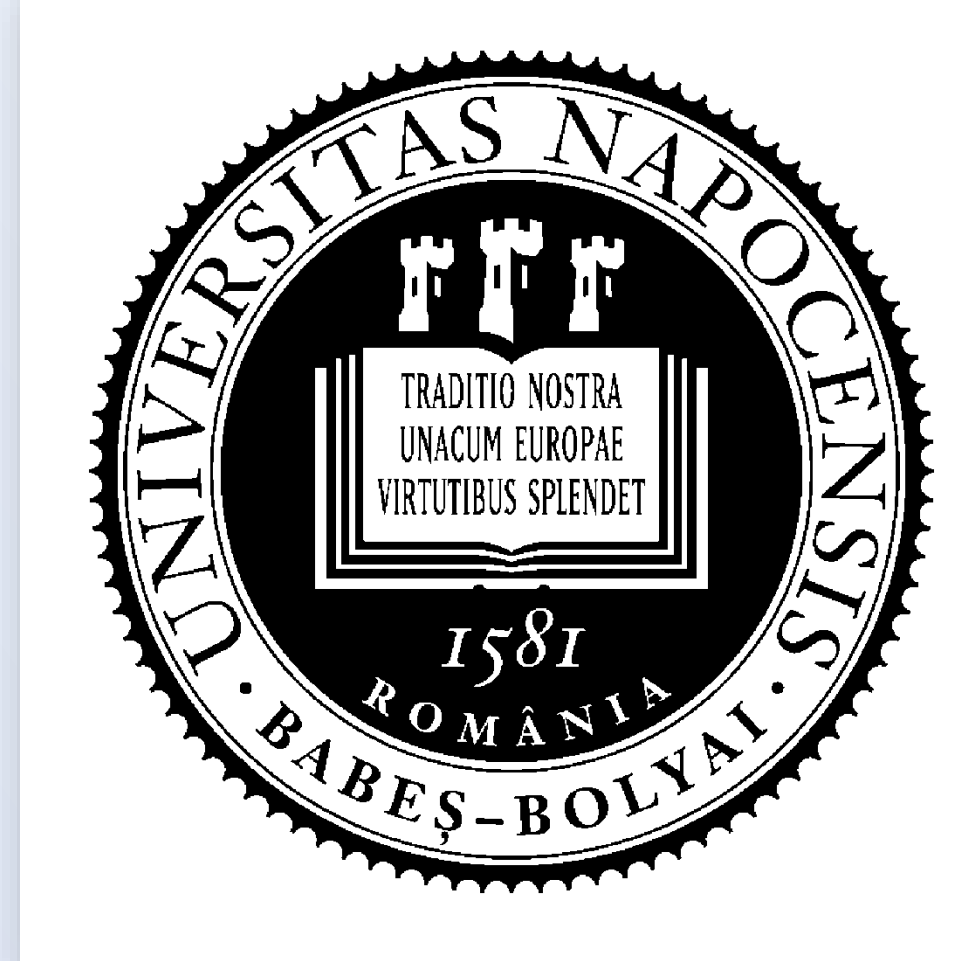
Zn(II)-ftalocianinok fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata UV-Vis spektroszkópiával és molekulamodellezéssel



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

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

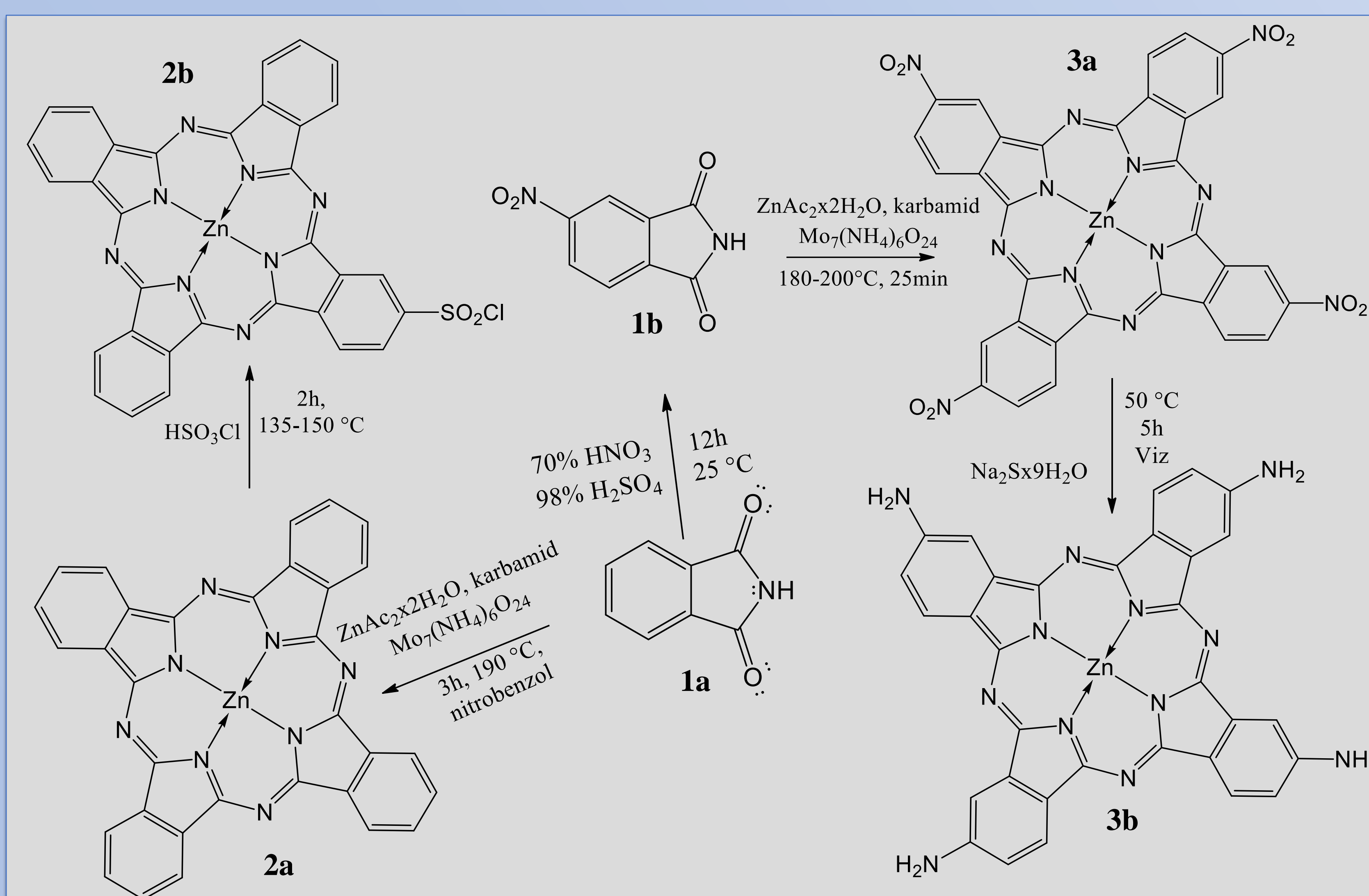
Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Magyar Kémiai és Vegyészmérnöki Intézet, Kolozsvár, Arany János utca, 11 szám, postakód 400028
e-mail: kiralyarni@gmail.com



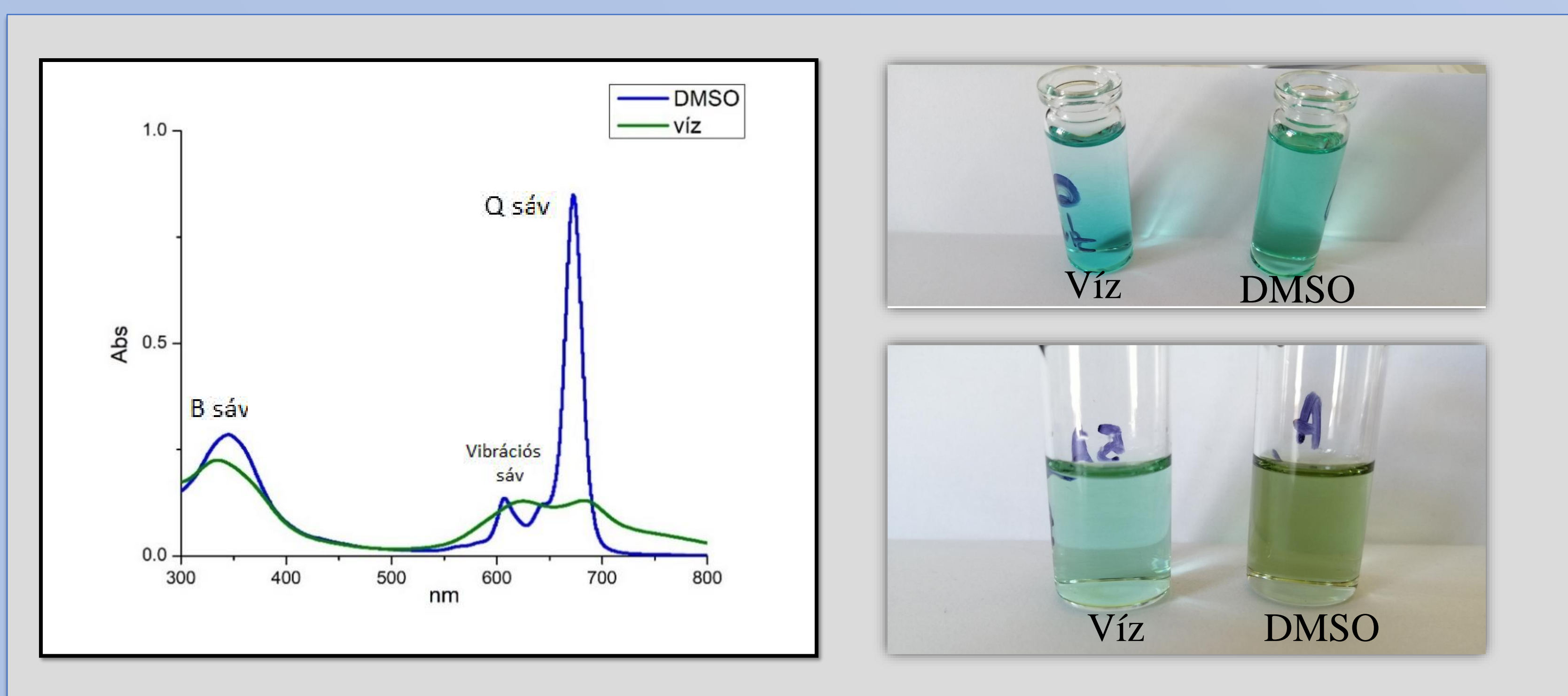
A ftalocianinok nagyon stabil, tetrapirrol gyűrűkből felépülő szintetikus, makrociklusos, aromás vegyületek. A makrociklus üregébe fém atom komplexálódhat, amely befolyásolja a molekula optikai tulajdonságait, ezért az átmenetifém által komplexált vegyületek különböző színűek és festékként alkalmazzák őket. A vízdoldható ftalocianinok a biológiában sejtfestésre használhatóak de elterjedtek a rákterápiában is mint fényérzékenyítő anyagok [1,2].

A kutatás célja a Zn(II)-ftalocianin előállítása és funkcionálizálása NO₂-, H₂N-, SO₂Cl- csoportokkal, majd a termékek UV-Vis spektroszkópiás tulajdonságainak vizsgálata. További cél volt az említett vegyületek modellezése DFT módszerek alkalmazásával, amely alapján a vizsgált ftalocianin származékok szerkezete és optikai tulajdonságai között kerestünk összefüggést.

Zn(II)-ftalocianin származékok előállítása



A ftalocianinok jellegzetes elnyelési sávjai és szolvatokrómia



2. Táblázat A 2a, 3a-b vegyületek UV-Vis spektroszkópiai vizsgálatának eredményei (oldószer: Dimetilszulfoxid)

Anyag	Hígítás	λ_{\max} [nm]		ϵ (Q sáv)	$\log_{10} \epsilon$
		B sáv	Q sáv	L/mol·cm	
2a	DMSO	344	672	39480	4,59
	Víz	335	683	6080	3,78
3a	DMSO	347	684	32100	4,50
	Víz	344	645	14400	4,15
3b	DMSO	357	729	428400	5,63
	Víz	337	666	184200	5,26

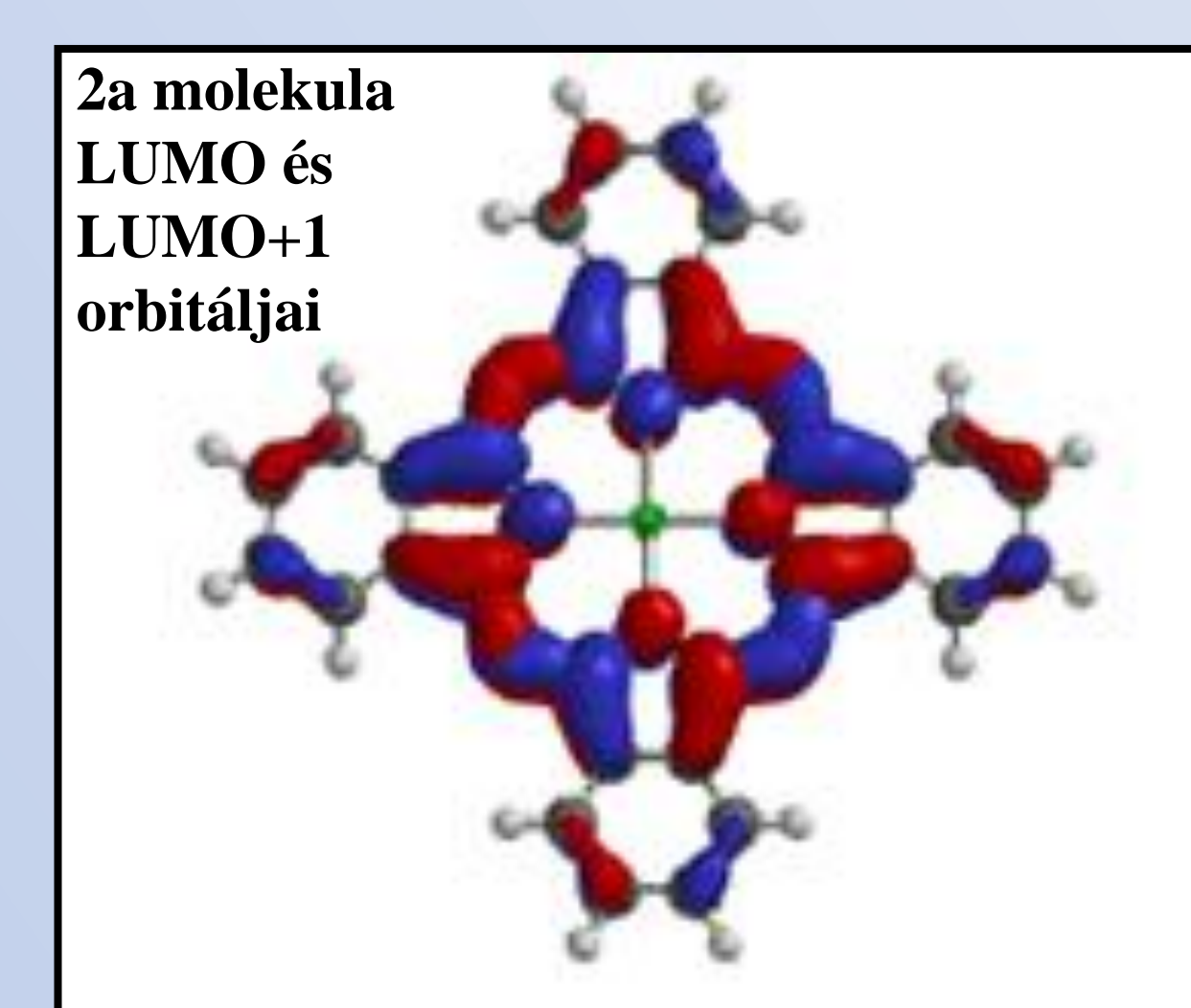
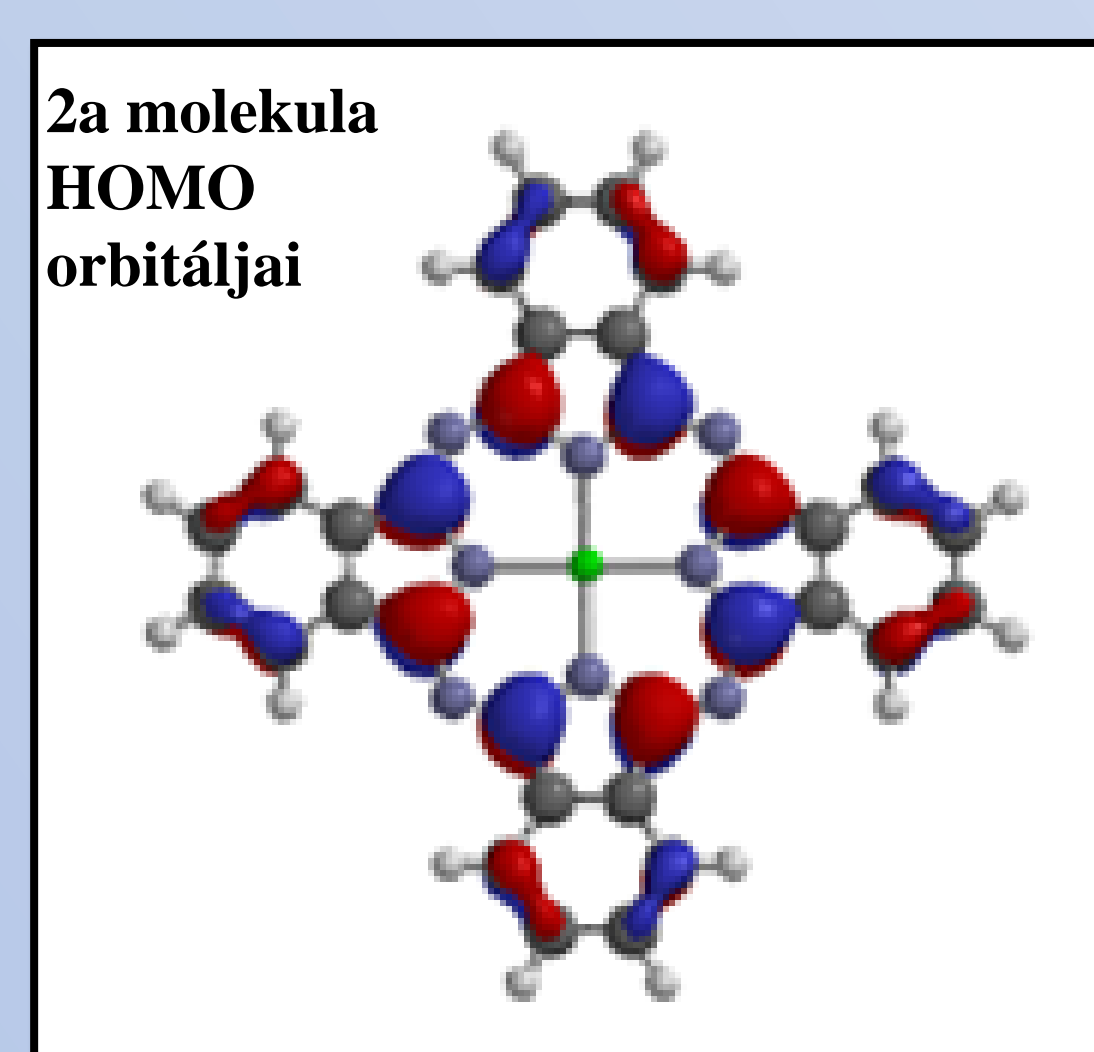
Következtetések

- A laboratóriumban végzett kutatómunka során sikerült előállítani és megvizsgálni 4 ftalocianin származékot.
- A vízzel hígított minták esetében felület aktív anyag jelenlétében felerősödött a molekulák abszorbanciája, amely az irodalomnak megfelelően hatással volt az aggregációra [4].
- Molekulamodellezés során sikerült optimalizálni a 2a, 3a és 3b szerkezeteket vákumban és DMSO-ban
- Mindkét esetben a LUMO és LUMO+1 pályák egyforma energiaszinten vannak.

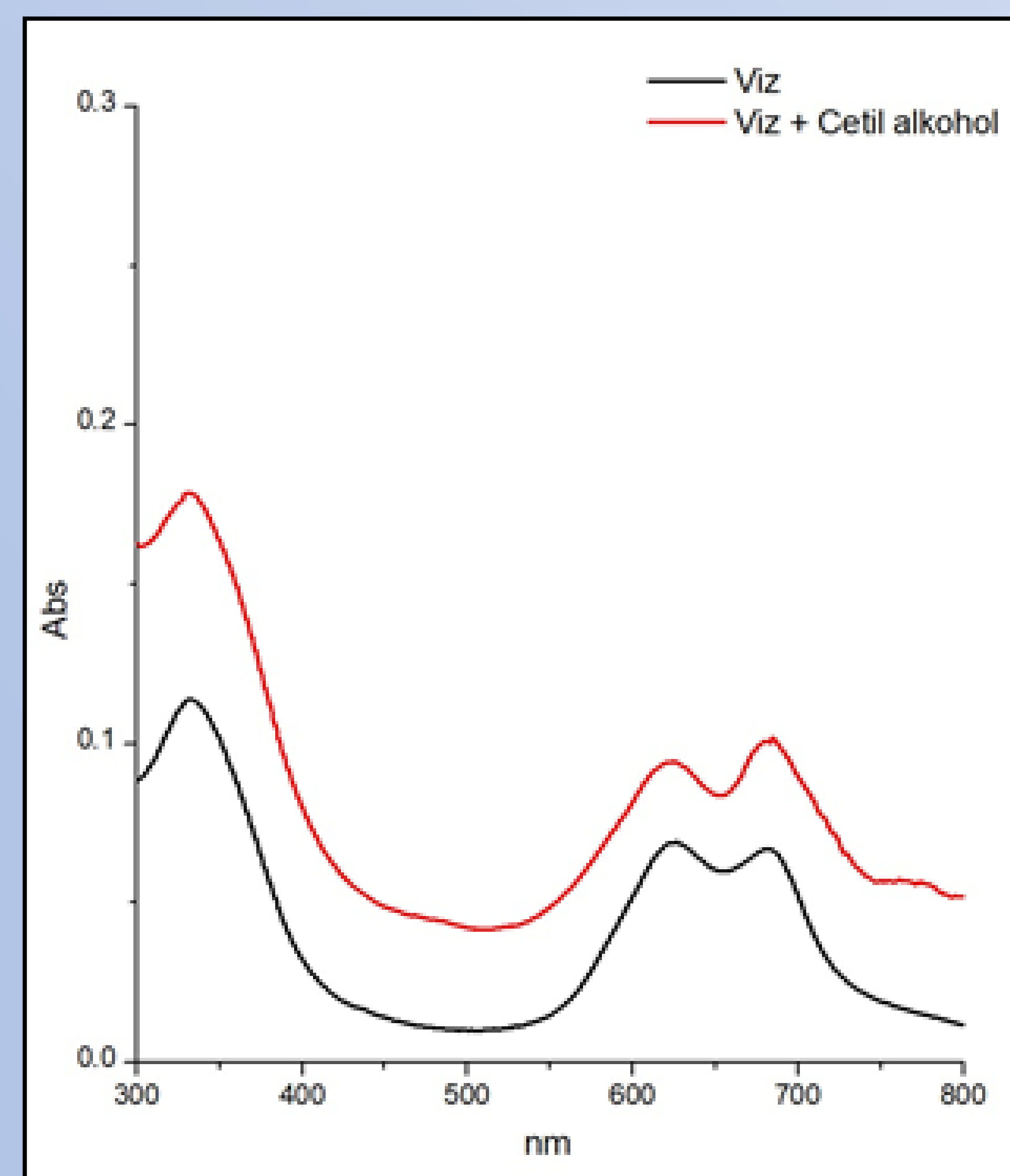
Molekulamodellezés

1. Táblázat A 3a szerkezet optimalizálási eredményei

Izomer	Relatív energia	HOMO	LUMO	Különbség
	$\frac{kJ}{mol}$	eV	eV	eV
D _{2h}	0	-6,09	-4,02	-2,07
C _{4h}	-1,94	-6,09	-3,96	-2,13
C _{2v}	-0,92	-6,09	-3,96	-2,13
C _s	-1,06	-6,09	-3,99	-2,1



Szurfaktáns hatása a Zn(II)-ftalocianin (2a) vízzel hígított oldatára



Irodalomjegyzék

- Mukaddes Ö., Serap S., Barbaros A., *Synthesis and Biological Uses of A3B Type Water-Soluble Phthalocyanine Alternate to Alcian Blue*, Chem. Pub. Soc. of Europe, **2018**, 3, 12805-12812
- Fabienne D., Mahmut D., *Synthetic pathways to water-soluble phthalocyanines and close analogs*, Coordination Chemistry Reviews, **2010**, 254 (23), 2792-2847
- Sun Y., Hu H., Zhao N., Xia T., *Multifunctional polycationic photosensitizer conjugates with rich hydroxyl groups for versatile water-soluble photodynamic therapy nanoplatforms*, Biomaterials, **2017**, 117, 77-91
- Senem C., Mahmut D., Salih Z.Y., *Tetrakis[2-[N-((3-morpholino) propyl) carbamate] oxyethyl] zinc(II) phthalocyanine and its water soluble derivatives: Synthesis, photophysical, photochemical and protein binding properties*, Journal of Photochemistry and Photobiology, **2016**, 325, 125-134