

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра лазерной физики и спектроскопии

ПИЛИПОВИЧ
Анна Сергеевна

**СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ДИОН- И ТРИОН- ГЕТЕРОЦИКЛОВ**

Реферат дипломной работы

Научные руководители:
Тихомиров С.А.
г.н.с., доктор физ-мат наук,
ГНУ «Институт физики имени
Б.И.Степанова НАН Беларуси»
Воропай Е.С.
профессор, доктор физ-мат наук,
профессор, кафедра лазерной
физики и спектроскопии БГУ

Минск, 2021

РЕФЕРАТ ДИПЛОМНОЙ РАБОТЫ

Пилипович А.С.

Спектрально-кинетические свойства органических соединений на основе дион- и трион- гетероциклов.

Научные руководители – главный научный сотрудник «Центра физики атомных и молекулярных систем» ГНУ «Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси», доктор физико-математических наук, Тихомиров С.А., профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии БГУ, доктор физико-математических наук, профессор Воропай Е.С.

Дипломная работа объемом 56 страниц состоит из введения, 3 глав, заключения, списка использованных источников (53). В дипломной работе представлено 35 рисунков.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ПЕРЕНОС ЗАРЯДА, ДУАЛЬНАЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ, ОБРАЗОВАНИЕ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ, ОРГАНИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ, ОСНОВНО-КИСЛОТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ.

Объект исследования – органические соединения на основе дион- и трион- гетероциклов.

Цель исследования: поиск новых соединений перспективных для применения в качестве эффективных флуоресцентных зондов на основе исследования спектрально-кинетических свойств синтезированных соединений.

Методы исследования: стационарная люминесценция и импульсная флуорометрия.

Полученные результаты и их новизна: В данной работе проведены спектрально-кинетические исследования свойств синтезированных соединений.

При изучении свойств соединения, транс-2-(4' - диметиламинобензилиден-ацетил)-5,5- диметилциклогексан-1,3-дион (сокращенно ДМД), было обнаружено возрастание дипольного момента ДМД более, чем в 2 раза, при переходе из основного S_0 состояния в нижнее электронно-возбужденное S_1 состояние, что указывает на значительное увеличение полярности молекулы в возбужденном состоянии. В этом случае хромофор может быть использован в качестве индикатора полярности среды. Также при изменении pH раствора ДМД переходит из одной цветовой формы в другую. Данное свойство может использоваться в медицине и в химическом анализе, например, для индикации кислотно-щелочного равновесия среды.

Изучение следующего соединения, 3,3,11,11-тетраметил-8,16-дифенил-3,4,8,10,11,12,13,14-октагидроакридино[4,3-с] акридин-1,9 (2Н,5Н) дион (сокращенно с-АКД), происходило совместно с коллегами из Волгоградского государственного университета в проекте Ф20Р-340 «Механизмы нарушения симметрии в возбужденных квадрупольных молекулах». В ходе нашего исследова-

ния обнаружено, что нарушение симметрии в данной соединении происходит за счет образования водородной связи.

Спектрально - кинетические исследования 10-гидрокси - 3,3,6,6,9-пентаметил-1,2,3,4,5,6,7,8,9,10-декагидроакридин-1,8-диона (АКД) в различных растворителях показали сильную зависимость спектров люминесценции от такого параметра растворителя, как основность (SB), который определяет его электронодонорную способность. В растворителях с высоким параметром SB: ДМСО (0.647), ДМФ (0.613), метанол (0.545) и этанол (0.685) впервые зарегистрирована дуальная флуоресценция, состоящая из коротковолновой (КФ, 460-490 нм) и длинноволновой (ДФ, 670-710 нм) полос флуоресценции. В растворителях с низким значением SB: ацетонитрил (0.286), хлористый метилен (0.178) и глицерин (0.309) спектр флуоресценции имеет одну полосу КФ. Анализ спектральных и кинетических данных затухания и разгорания флуоресценции п-АКД в ДМСО позволил установить механизм образования ДФ из КФ, который состоит в переносе электрона от растворителя к молекуле хромофора в возбужденном состоянии с последующим высвечиванием его анионной формы.

Полученные в настоящей работе результаты дают полезную информацию о механизме межмолекулярного взаимодействия полярной среды с молекулой хромофора. Обнаруженное впервые явление дуальной флуоресценции п-АКД может найти практическое применение в биологии и медицине в качестве флуоресцентного зонда для тестирования полярности среды.

РЭФЕРАТ ДЫПЛОМНАЙ РАБОТЫ

Піліповіч Г.С.

Спектральна-кінетычна ўласцівасці арганічных злучэнняў на аснове дыён- і трыён- гетэроцыклоў.

Навуковыя рукаводзіцелі- галоўны навуковы супрацоўнік «Цэнтра фізікі атамнах і малекулярных сістэм» ДНУ "Інстытут фізікі імя Б.І. Сцяпанавы НАН Беларусі », доктар фізіка-матэматычных навук, Ціхаміраў С.А., прафесар кафедры лазернай фізікі і спектраскапіі БДУ, доктар фізіка-матэматычных навук, прафесар Воропай А.С.

Дыпломнае даследаванне складаецца з уводзінаў, 3 глаў, заключэння, спіса выкарыстанай літаратуры (53) і займае 56 старонкі. У дыпломнай рабоце прадстаўлена 35 малюнкаў.

КЛЮЧАВЫЯ СЛОВЫ: ПЕРАНОС ЗАРЯДУ, ДУАЛЬНАЯ ФЛУАРЭСЦЭНЦЫЯ, АДУКАЦЫЯ ВАДАРОДНАЙ СУВЯЗІ, АРГАНІЧНЫЯ ЗЛУЧЭННІ, АСНОЎНА-КІСЛОТНЫЯ УЗАЕМАДЗЕЙНІ.

Аб'ект даследавання - арганічныя злучэнні на аснове дыён- і трыён-гетэроцыклов.

Мэта даследавання: пошук рэчываў у якасці эфектыўных флуорэсцэнтных зондаў, індыкатараў рН асяроддзя.

Метады даследавання: стацыянарная люмінесцэнцыя і імпульсная флуорыметрыя.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: У дадзенай працы праведзены спектральна-кінетычныя даследаванні ўласцівасцяў сінтэзаваных злучэнняў. Пры вывучэнні ўласцівасцяў злучэння, транс-2- (4'-диметиламинобензилиденацетил) -5,5- диметилциклогексан-1,3-Дыён (скарочана ДМД), было выяўлена ўзрастанне дыпольнага моманту ДМД больш, чым у 2 разы, пры пераходзе з асноўнага S₀ стану ў ніжняе электронна-узбуджаная S₁ стан, што паказвае на значнае павелічэнне палярнасці малекулы ва ўзбуджаным стане. У гэтым выпадку хромофаров можа быць выкарыстаны ў якасці індыкатара палярнасці асяроддзя. Таксама пры змене рН раствора ДМД пераходзіць з адной каляровай формы ў іншую. Дададзеныя ўласцівасці можа выкарыстоўвацца ў медыцыне і ў хімічным аналізе, напрыклад, для індывідуальнай кіслотна-шчолачнай раўнавагі асяроддзя. Вывучэнне наступнага злучэння, 3,3,11,11-тетраметил-8,16-дифенил-3,4,8,10,11,12,13,14-октагидроакридино [4,3-с] акридин-1,9 (2Н, 5Н) Дыён (скарочана з-АКД), адбывалася сумесна з калегамі з Валгаградскага дзяржаўнага ўніверсітэта ў праекце Ф20Р-340 «Механізмы парушэння сіметрыі ў узбуджаных квадрупольны малекулах». У ходзе нашага даследавання выяўлена, што парушэнне сіметрыі ў дадзенай

злучэнні адбываецца за кошт адукацыі вадароднай сувязі. Спектральна - кінэтычныя даследаванні 10-гідраксілу - 3,3,6,6,9-пентаметил-1,2,3,4,5,6,7,8,9,10-декагідроакридин-1,8-Дыён (АКД) у розных растваральніках паказалі моцную залежнасць спектраў люмінесценцыі ад такога параметру растваральніка, як асноўнага (SB), які вызначае яго электронодонорную здольнасць. У растваральніках з высокім параметрам SB: ДМСО (0.647), ДМФ (0.613), метанол (0.545) і этанол (0.685) упершыню зарэгістраваная дуальнага флуарэсэнцыі, якая складаецца з караткахвалевай (КФ, 460-490 нм) і даўгахвалевай (ДФ, 670-710 нм) палос флуарэсэнцыі. У растваральніках з нізкім значэннем SB: ацэтанітрылу (0.286), хларысты пазначаў (0.178) і гліцэрына (0.309) спектр флуарэсэнцыі мае адну паласу КФ. Аналіз спектральных і кінэтычных дадзеных згасання і разгорання флуарэсэнцыі п-АКД ў ДМСО дазволіў усталяваць механізм адукацыі ДФ з КФ, які складаецца ў пераносе электрона ад растваральніка да малекулы храмафору ва ўзбуджаным стане з наступным высвятлення яго аніённай формы. Атрыманая ў сапраўднай працы вынікі даюць карысную інфармацыю аб механізме межмолекулярных ўзаемадзеяння палярнай асяроддзя з малекулай храмафору. Выяўленае ўпершыню з'ява дуальнай флуарэсэнцыі п-АКД можа знайсці практычнае прымяненне ў біялогіі і медыцыне ў якасці флуорэсцэнтнай зонда для тэставання палярнасці асяроддзя.

GRADUATE PROJECT ESSAY

Pilipovich H.S.

Spectral and kinetic properties of organic compounds based on dione and trione heterocycles.

ABSTRACT

Project Supervisors - chief researcher at the Center for Physics of Atomic and Molecular Systems of the State Scientific Institution "Institute of Physics named after B.I. Stepanov National Academy of Sciences of Belarus ", Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Tikhomirov S.A., Professor of the Department of Laser Physics and Spectroscopy of the Belarusian State University, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor Voropay E.S.

The diploma study consists of an introduction, 3 chapters, conclusion, list of references (50) and takes 54 pages. The diploma study contains 25 drawings.

KEY WORDS: DUAL FLUORESCENCE, ORGANIC COMPOUNDS, BASIC ACID INTERACTION.

The object of the research - organic compounds based on dione and trione heterocycles.

The aim of the research: search for substances as effective fluorescent probes, indicators of the pH of the medium.

Research methods: stationary luminescence and pulse fluorimetry.

The results and their novelty: In this work was studies of the spectral-kinetic properties of the synthesized compounds are carried out.

When studying the properties of the compound, trans-2- (4 '- dimethylamino-benzylideneacetyl) -5,5-dimethylcyclohexane-1,3-dione (abbreviated as DMD), an increase in the dipole moment of DMD was found by more than 2 times upon transition from the basic S₀ states to the lower electronically excited S₁ state, which indicates a significant increase in the polarity of the molecule in the excited state. In this case, the chromophore can be used as an indicator of the polarity of the medium. Also, when the pH of the solution changes, DMD passes from one color form to another. This property can be used in medicine and in chemical analysis, for example, to indicate the acid-base balance of the medium.

Study of the following compound, 3,3,11,11-tetramethyl-8,16-diphenyl-3,4,8,10,11,12,13,14-octahydroacridino [4,3-c] acridine-1,9 (2H, 5H) dione (abbreviated as s-AKD), took place together with colleagues from Volgograd State University in the project F20R-340 "Mechanisms of symmetry breaking in excited quadrupole molecules." In the course of our research, it was found that symmetry breaking in this compound occurs due to the formation of a hydrogen bond.

Spectral and kinetic studies of 10-hydroxy-3,3,6,6,9-pentamethyl-1,2,3,4,5,6,7,8,9,10-decahydroacridine-1,8-dione (AKD) in various solvents showed a strong dependence of the luminescence spectra on such a solvent parameter as ba-

sicity (SB), which determines its electron-donating ability. In solvents with a high SB parameter: DMSO (0.647), DMF (0.613), methanol (0.545), and ethanol (0.685), dual fluorescence was recorded for the first time, consisting of short-wavelength (CF, 460-490 nm) and long-wavelength (DF, 670-710 nm) fluorescence bands. In solvents with a low SB value: acetonitrile (0.286), methylene chloride (0.178), and glycerol (0.309), the fluorescence spectrum has one CF band. An analysis of the spectral and kinetic data on the decay and rise of p-AKD fluorescence in DMSO made it possible to establish the mechanism of DP formation from CF, which consists in the transfer of an electron from the solvent to a chromophore molecule in an excited state, followed by the emission of its anionic form.

The results obtained in this work provide useful information on the mechanism of intermolecular interaction of a polar medium with a chromophore molecule. The phenomenon of p-AKD dual fluorescence discovered for the first time can find practical application in biology and medicine as a fluorescent probe for testing the polarity of a medium.