

Oktacianometilēnaizvietota *s*-indacēna-1,3,5,7(2*H*,6*H*)-tetraona akceptoru fragmentu saturošu hromoforu sintēze un to optiskās īpašības

Arnis Žagata (2. kursa ķīmijas tehnoloģijas bakalaura programmas students)

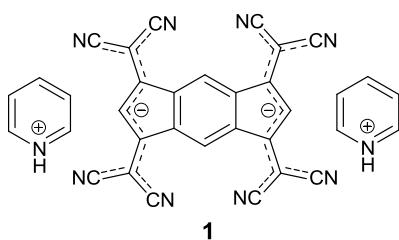
Dr. Chem. Kaspars Traskovskis, (zinātniskais vadītājs)

Profesors, *Dr. Chem.* Valdis Kokars (zinātniskais vadītājs)

*Lietišķās ķīmijas institūts, Materiālzinātnes un lietišķās ķīmijas fakultāte,
Rīgas Tehniskā universitāte
e-pasts: arniszagata@inbox.lv*

Balstoties uz to, ka *s*-indacēna-1,3,5,7(2*H*,6*H*)-tetraona ("Janus diona") akceptoru saturošiem D- π -A hromoforiem piemīt trešās kārtas nelineāri optiskie efekti [1], tika izvirzīts mērķis- sintezēt līdzīgas struktūras elektronu akceptoru fragmentu ar spēcīgāku akceptoru spēju, uz tā bāzes veikt hromoforu sintēzi un sākt to optisko īpašību mērījumus.

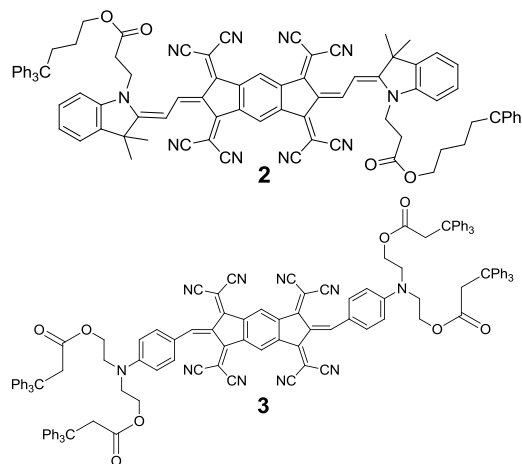
Šis mērķis tika realizēts, aizstājot "Janus diona" karbonilgrupas ar dicianometilēn grupām. Iegūtais akceptors dipiridīnija sāls formā (**1**) (1. att.) analogiski "Janus dionam" tika pielietots tālākās kondensācijas reakcijās, kuru rezultātā tika iegūti D- π -A hromofori (2. att.) ar donorajiem fragmentiem uz indola (**2**) un anilīna (**3**) bāzes.



1.att. Oktacianometilēnaizvietota "Janus diona" dipiridīnija sāls.

Optiskās īpašības tika pētītas izmantojot UV-Vis spektroskopiju. Iegūtie rezultāti CHCl₃ šķīdumā: "Janus diona" akceptoru hromoforam ar donoru uz anilīna bāzes $\lambda_{\max}=546\text{nm}$, $\epsilon=200054\text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$, **2** hromoforam $\lambda_{\max}=638\text{nm}$, $\epsilon=130386\text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$, **3** hromoforam $\lambda_{\max}=704\text{nm}$, $\epsilon=76206\text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$. Izteikta batohromā absorbcijas maksimumu nobīde apstiprina, ka jauniegūtais elektronu akceptors ir spēcīgāks par "Janus dionu". Pēc veiktajiem kvantu ķīmiskajiem aprēķiniem tika secināts, ka, palielinot π tiltna garumu starp indacēna un elektrondonorā

fragmenta cikliem (salīdzinot struktūras **3** un **2**), ir iespējams samazināt stērisko atgrūšanās efektu izsaukto akceptorā fragmenta deformāciju, tādējādi palielinot hromofora absorbcijas koeficienta vērtību.



2. att. Sintezētie D- π -A hromofori.

LITERATŪRA

[1] R. D. Breukers, A. P. Middleton et al., *Proc. of SPIE* **2013** Vol. 8827 88270N-1.

Synthesis and optical properties of chromophores containing octacyanomethylene substituted *s*-indacene-1,3,5,7(2*H*,6*H*)-tetraone acceptor fragment. D- π -A chromophores with octacyanomethylene substituted *s*-indacene-1,3,5,7 (2*H*, 6*H*) -tetraone electron acceptor were synthesized in condensation reactions with indole and aniline based electron donor groups. The initial optical properties were investigated using UV-Vis spectroscopy. The obtained results in CHCl₃ solution are following: for the indole donor based chromophore $\lambda_{\max}=638\text{ nm}$, $\epsilon=130386\text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$ and for aniline donor based chromophore: $\lambda_{\max}=704\text{ nm}$, $\epsilon=76206\text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$. The results of quantum chemical calculations revealed that an increase of the length of the π bridge between indacene and electron donor rings reduces the structural deformation of the acceptor moiety, thereby increasing the value of the chromophore absorption coefficient.