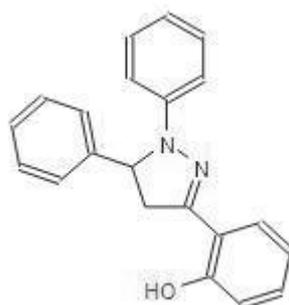


РЕАКЦИЯ ФОТОПЕРЕНОСУ ПРОТОНА ТА СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ 1,5-ДИФЕНІЛ-3-(2'-ГІДРОКСИФЕНІЛ)-2-ПІРАЗОЛІНУ*Чепелева Л. В., Нужный О. О.*Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
alex_nuzhny@mail.ru

В настоящее время ведется активный поиск соединений, пригодных для обнаружения катионов металлов. Эти соединения должны иметь высокий квантовый выход флуоресценции, хорошую растворимость в растворителях различной природы, быть фото- и термостабильными, обладать высокой селективностью. Исследование производных 1,3,5-триарил-2-пиразолина представляет несомненный интерес, т. к. эти соединения являются эффективными органическими люминофорами и при наличии соответствующих заместителей вполне могут рассматриваться как потенциальные хемосенсоры на катионы различных металлов.



Квантово-химическое моделирование строения 1,5-дифенил-3-(2'-гидроксифенил)-2-пиразолина в основном и электронно-возбужденном состояниях, проведенное методом (TD)DFT, показало, что довольно прочная внутримолекулярная водородная связь существует уже в основном состоянии исследованного соединения, становясь еще более прочной при переходе в нижнее синглетное возбужденное состояние S_1^* . Кроме того, протондонорная группа OH и пиразолиновый цикл заметно сближены в возбужденном состоянии. Эти факторы обуславливают протекание реакции внутримолекулярного фотопереноса протона.

В спектрах флуоресценции 1,5-дифенил-3-(2'-гидроксифенил)-2-пиразолина наблюдаются две полосы. Длинноволновая полоса высокой интенсивности ($\lambda_{\max} = 530$ нм, раствор в ацетонитриле) с аномально большим стоксовым сдвигом (9020 см^{-1}) соответствует испусканию продукта внутримолекулярного фотопереноса протона. Коротковолновая полоса очень малой интенсивности ($\lambda_{\max} = 433$ нм) принадлежит молекулярной форме, где фотоперенос протона не происходит.

Была проведена серия экспериментов по изучению влияния катионов металлов на флуоресценцию исследуемого соединения. Постепенное увеличение концентрации катиона металла вызывает уменьшение интенсивности длинноволновой полосы флуоресценции, следовательно, имеет место тушение флуоресценции фототаутомерной формы. Это тушение имеет динамический характер, т. е. контролируется диффузией. Интенсивность коротковолновой полосы флуоресценции, принадлежащей молекулярной форме, остается без изменений. Таким образом, комплекс с катионом металла данное производное пиразолина не образует. Исследованный 1,5-дифенил-3-(2'-гидроксифенил)-2-пиразолин может быть использован в качестве модельного соединения при установлении природы центров комплексообразования в других производных 1,3,5-триарил-2-пиразолина.