

## ВЛИЯНИЕ ОКРУЖЕНИЯ И N-СОДЕРЖАЩИХ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРАСИТЕЛЯ BODIPY: ЭКСПЕРИМЕНТ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Невидимов А.В.,<sup>а,б</sup> Гадомская А.В.,<sup>а,б</sup> Николенко Л.М.,<sup>а,б</sup> Озивская Е.В.,<sup>а,в</sup> Разумов В.Ф.<sup>а,б,в</sup>

<sup>а</sup>Институт проблем химической физики Российской Академии Наук,  
142432, Московская область, Черноголовка, проспект Семёнова, 1,  
e-mail: nevidimovsasha@yandex.ru

<sup>б</sup>Московский физико-технический институт,

141701, Московская область, Долгопрудный, Институтский пер., 9

<sup>в</sup>Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, ФФФХИ,  
119991 Москва, Ленинские горы.

В работе проведено комплексное экспериментальное (спектроскопия) и теоретическое (квантовая химия, GAMESS) исследование ряда азотсодержащих производных красителя 4-боро-3а,4а-диаза-5-индацена (BODIPY, Рис. 1). Установлено, что одновременное присутствие электронодонорных и электроноакцепторных групп в составе BODIPY делает эту молекулу чрезвычайно чувствительной как к выбору самих групп, так и к окружению [1,2]. Например, в полярных растворителях происходит почти полное тушение люминесценции независимо от расположения N-групп, а в бензоле и толуоле положение аминокгруппы (R2) оказывается решающим.

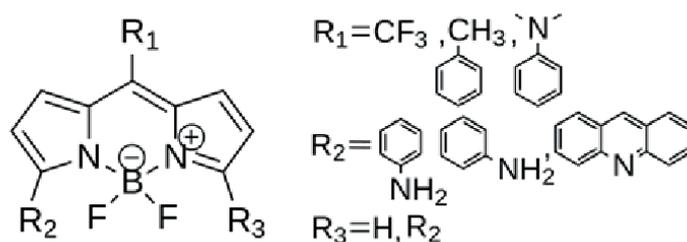


Рисунок 1. Структуры молекул BODIPY, исследованных в работе.

### Литература

1. Petrushenko K.B., Petrushenko I.K., Petrova O.V., Sobenina L.N., Ushakov I.A., Trofimov V.A. Asian J. Org. Chem., 2017, 6, 852.
2. Невидимов А.В., Кременец В.А., Спирин М.Г., Николенко Л.М., Бричкин С.Б., Разумов В.Ф. Химия Высоких Энергий, 2019, 53, 116.

Работа выполнена по теме гос. задания (№0089-2019-0003) и при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по Программе повышения конкурентоспособности МФТИ «5–100» среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2016–2020 гг. (№074-02-2018-286).