

Nitrilo junginių struktūros įtaka nanoagregatų formavimui ir jų optinėms savybėms

Impact of nitrile compound structure to nanoaggregate formation and their optical properties

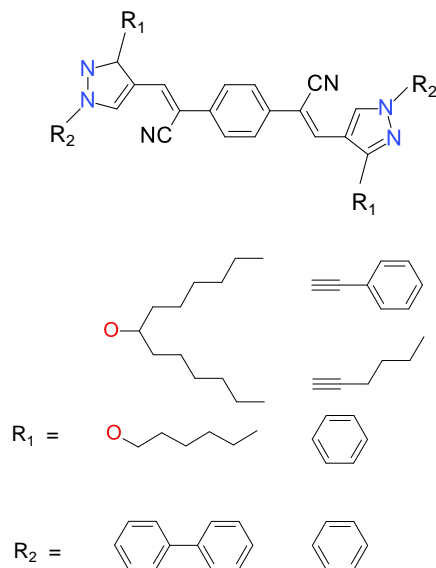
Gintarė Kuksėnaitė¹, Karolis Kazlauskas¹, Gediminas Kreiza¹, Arūnas Miasojedovas¹, Edvinas Radiusas¹, Paulius Baronas¹, Aurimas Bieliauskas², Vytautas Getautis², Algirdas Šačkus², Saulius Juršėnas¹

¹Taikomųjų Mokslų Institutas, Vilniaus Universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

²Organinės Chemijos Katedra, Kauno Technologijos Universitetas, K. Donelaičio g. 73, LT-44249 Kaunas
gintare.kuksenaite@gmail.lt

Fluorescuojantys organiniai nanodariniai yra patrauklūs dėl savo tinkamumo technologiniams taikymams. Buvo pademonstruota, kad fluorescuojančių nanoagregatų panaudojimas yra tinkamas konstruojant organinius šviestukus, organinius lauko tranzistorius ir kitus optoelektroninius prietaisus. Taip pat, šie dariniai tinkami biologiniam vaizdinimui ir fluorescenciniams jutikliams, kadangi fluorescuojantys organiniai nanoagregatai paprastai formuojami iš persuktos erdvinės struktūros molekulių, kurioms būdingas agregacijos sukeltos fluorescencijos reiškinys. [1]

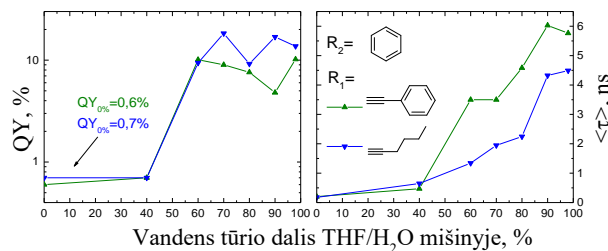
Šiame darbe ištirti ir aptarti aštuoni nitrilo klasės junginiai su identiškais kamienais, bet skirtingomis funkcinėmis grupėmis (1 pav.). Funkcinės (diheksilo, fenilo, heksilo, butilo) šoninės grupės prijungtos per papildomas deguonies, acetileno, metilo jungtis. Junginių kamieno esanti nitrilo grupė dėl erdvinės sąveikos lemia centrinio fenilo žiedo išsisukimą. Pirazolo funkcinė grupė yra įvesta į junginių kamieną siekiant sustiprinti tarpmolekulinius vandenilinius ryšius bei π - π sąveikas, kurios yra svarbios agregatų susidaryme. [2]



1 pav. Tirtų junginių struktūrinė formulė

Šių junginių nanoagregatai buvo formuojami precipitacijos metodu. Tirtos molekulės prastai fluorescuoja mažos koncentracijos tirpaluose (10^{-5} mol/L) dėl sparčios nespindulinės relaksacijos, o iš jų suformuotos nanodalelės demonstruoja agregacijos

sukeltos fluorescencijos reiškinį - fluorescencijos intensyvumo augimą (2 pav.). Nustatyta, jog siekiant stipresnio agregacijos sukeltos fluorescencijos efekto, reikalinga naudoti fenilo grupes, kurios yra prijungtos trumpomis (viengubomis) jungtimis prie centrinio nitrilo junginio kamieno, o ne ilgas konjuguotas jungtis (pavyzdžiui, acetileno jungtimi prijungta fenilo grupė). Taip pat, pavienių nitrilo molekulių mažam fluorescencijos kvantiniam našumui ($\leq 1\%$) tirpale didžiausią įtaką daro jų kamieno centrinio fenilo sukamieji virpesiai, sąlygojantys sparčią nespindulinę relaksaciją. Šiame darbe buvo pademonstruota, jog keičiant technologinius parametrus (THF/H₂O tūrio proporcijas), galima kontroliuoti nanoagregatų dydį, morfologiją ir kvantinį fluorescencijos našumą.



2 pav. Tirtų junginių su fenilo ir butilo pakaitais fluorescencijos kvantinio našumo (QY) ir vidutinės fluorescencijos gesimo trukmės $\langle \tau \rangle$ priklausomybė nuo vandens tūrio dalies tetrahidrofurano ir vandens mišinyje

Reikšminiai žodžiai: nanoagregatai, fluorescuojantys organiniai nanodariniai, agregacijos sukelta fluorescencija, precipitacijos metodas.

Literatūra

- [1] J. Mei, N. L. C. Leung, R. T. K. Kwok, J. W. Y. Lam, ir B. Z. Tang, „Aggregation-Induced Emission: Together We Shine, United We Soar!“, Chem. Rev., t. 115, nr. 21, p. 11718–11940, 2015.
- [2] K. Kazlauskas et al., „Morphology and emission tuning in fluorescent nanoparticles based on phenylenediacetonitrile“, J. Phys. Chem. C, t. 118, nr. 43, p. 25261–25271, 2014.