

PR-118

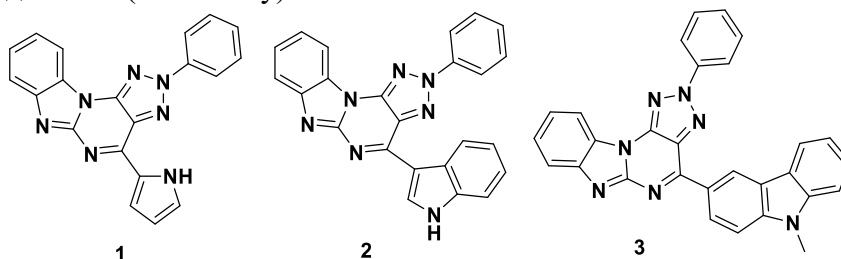
**ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИИ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО»
НА ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФЛУОРОФОРОВ
НА ОСНОВЕ 4-(ГЕТЕРО)АРИЛЗАМЕЩЕННЫХ 2H-
БЕНЗО[4,5]ИМИДАЗО[1,2-*a*][1,2,3]ТРИАЗОЛО[4,5-*e*]ПИРИМИДИНОВ**

**Тания О. С.¹, Федотов В. В.^{1,2}, Копчук Д. С.^{1,2}, Ковалев И. С.¹, Зырянов Г. В.^{1,2},
Чупахин О. Н.^{1,2}, Чарушин В. Н.^{1,2}**

¹ Кафедра органической и биомолекулярной химии. Уральский федеральный университет, ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия. Тел. (343) 375-45-01

² Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН, Ул. Ковалевской, 22. ул. Академическая, 20. г. Екатеринбург, 620990. Россия
Тел./факс: (343) 369-30-58. E-mail: olga.tania@urfu.ru

В настоящее время азолоазины, содержащие подобные природным такие гетероциклические фрагменты, как пурины и пиримидины, привлекают значительное внимание не только в связи с широким спектром их биологической активности и многочисленными терапевтическими применениями в медицине [1], но и неординарными фотофизическими характеристиками [2]. Фотофизические исследования наиболее перспективных флуорофоров из полученного ряда 4-гетероарилзамещенных 2H-бензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]триаоло[4,5-*e*]пиримидиновых производных подтвердили, что концевые функциональные группы и их относительное расположение в каркасе азолопиримидина играют решающую роль в модуляции/тюнинге фотофизических и электрохимических свойств, а следовательно, и в регулировании энергетической щели ВЗМО-НСМО. Для **1-3**, как результат, в соответствии с уравнением Липперта – Матага, был доказан положительный сольватохромизм с преобладающим LE-состоянием ($\Delta\mu < 10D$). Для **3** наблюдалось усиление эмиссии в результате агрегации в случае соотношения ТГФ-вода 90:10 (по объему).



#	λ_{abs} , nm	λ_{em} , nm	Φ^a , %	τ (ns)	$\Delta\mu$, D
1	256, 279, 403	523, 557	42	4.3	9.6
2	257, 274, 403	527, 555	43	4.6	7.3
3	279, 415	549	39	4.2	9.3

^a Квантовый выход измерен в ТГФ

Библиографический список

- [1] V. V. Fedotov, V.L. Rusinov, E.N. Ulomsky, E.M. Mukhin, E.B. Gorbunov, O.N. Chupakhin, Pyrimido[1,2-*a*]benzimidazoles: synthesis and perspective of their pharmacological use, Chem. Heterocycl. Compd. 57 (2021) 383–409. doi:10.1007/s10593-021-02916-4.
- [2] V. V. Fedotov, E.N. Ulomsky, N.P. Belskaya, A.K. Eltyshv, K. V. Savateev, E.K. Voinkov, D.N. Lyapustin, V.L. Rusinov, Benzimidazoazapurines: Design, Synthesis, and Photophysical Study, J. Org. Chem. 86 (2021) 8319–8332. doi:10.1021/acs.joc.1c00760.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 21-13-00304)