

REVERZIBILNI HALOGEN SUPSTITUISANI BENZILIDENHIDANTOINSKI MOLEKULSKI PREKIDAČI

Kristina Gak Simić, Anita Lazić, Nemanja Trišović, Nataša Valentić, Luka Matović
Inovacioni centar Tehnološko–metalurškog fakulteta, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija
Tehnološko–metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija

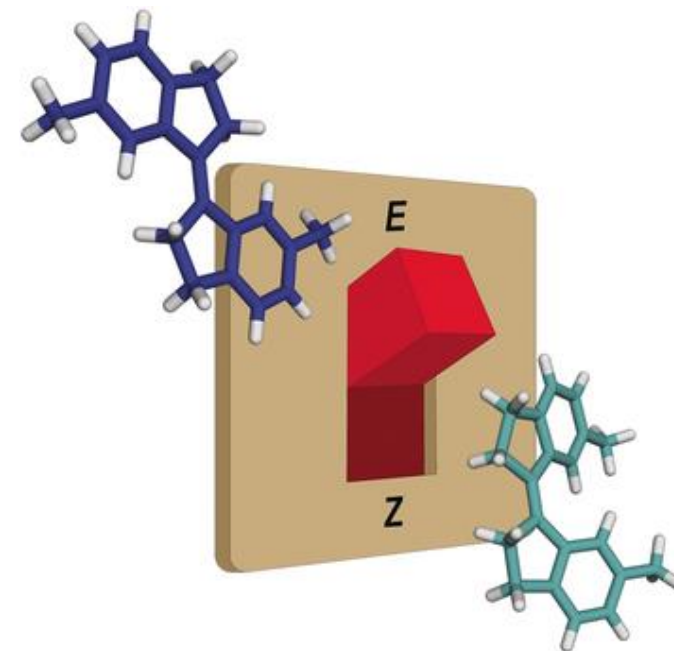


Procesing '21 3. i 4. jun 2021, Fakultet tehničkih nauka, Novi Sad

Molekulski prekidači - mogu se reverzibilno prevoditi iz jednog stabilnog stanja u drugo pod dejstvom nekog spoljašnjeg faktora.

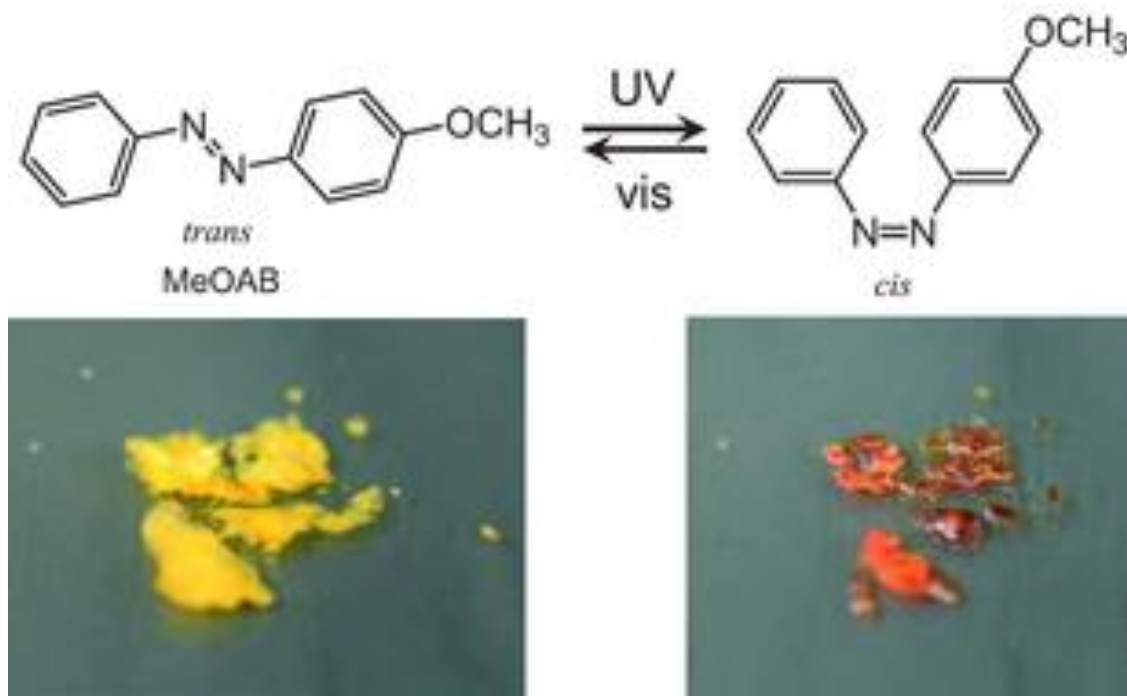
Primenjuju se u proizvodnji različitih optičkih i elektronskih uređaja, pametnih materijala kao i raznovrsnih materijala sa biološkom primenom.

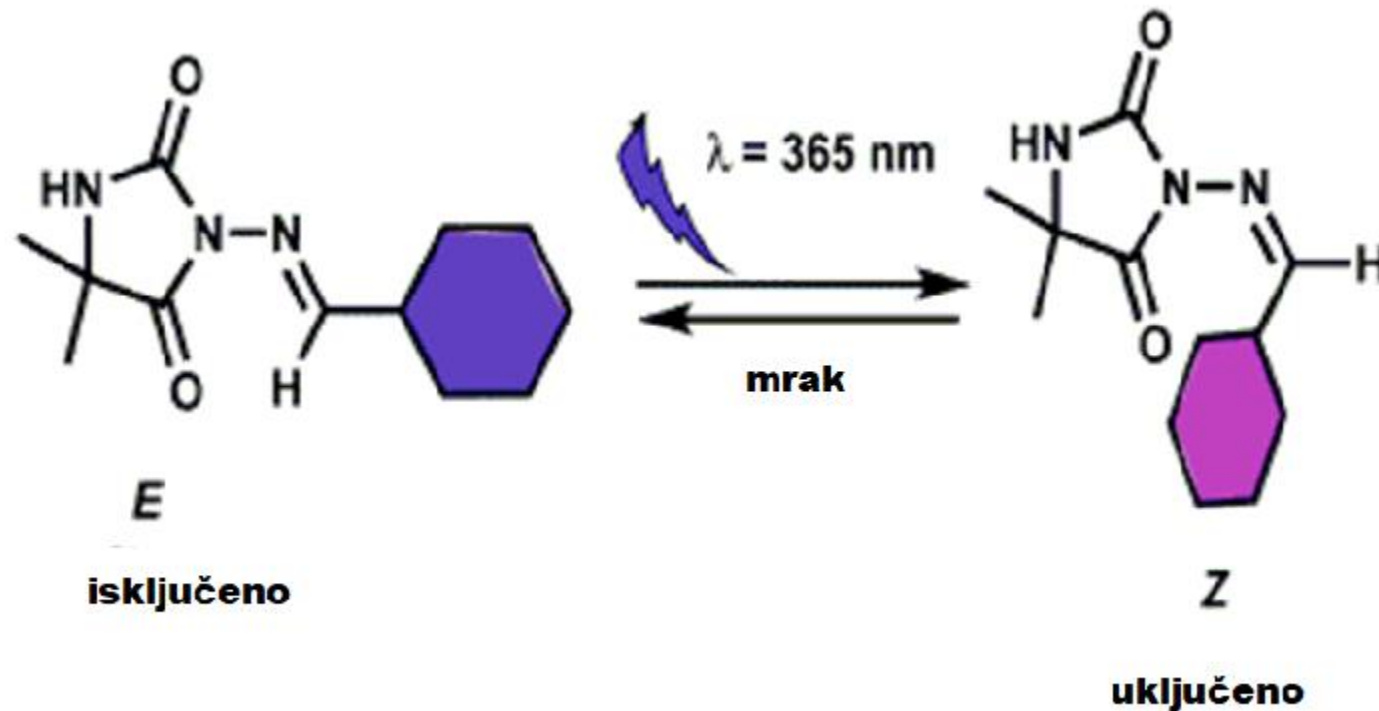
Bistabilni fotohromni organski molekuli, predstavljaju atraktivne materijale za proizvodnju molekulskih prekidača zahvaljujući svojoj strukturnoj raznovrsnosti, molekulskim konformacijama, elektronskim karakteristikama i mogućnosti prevođenja iz jednog stabilnog stanja u drugo pod dejstvom svetlosti.



Fotoprekidači (engl. photoswitches) – molekuli koji imaju sposobnost reverzibilne izomerizacije između 2 stabilna stanja.

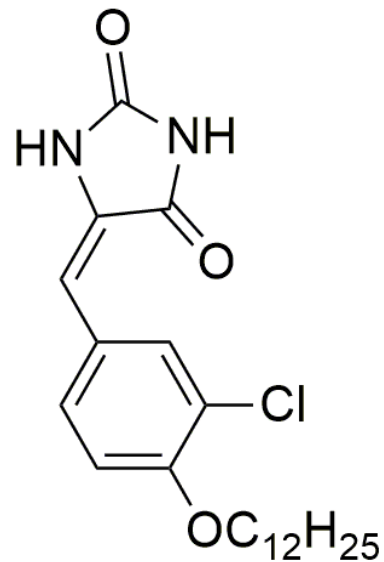
Mali molekuli, zahtevaju fotone visokog sadržaja energije za *E* – *Z* izomerizaciju.



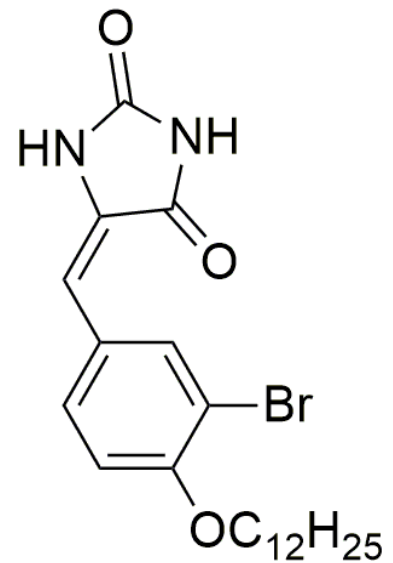


Konverzija Šifove baze pod uticajem UV - svetlosti

Photochromic and molecular switching behaviour of new Schiff base containing hydantoin ring: Synthesis, characterization and crystal structure - P. Todorov, P. Peneva, S. Georgieva, R. Rusew, B. Shivachev, A. Georgiev, New Journal of Chemistry, 6 (2019) 2740–2751



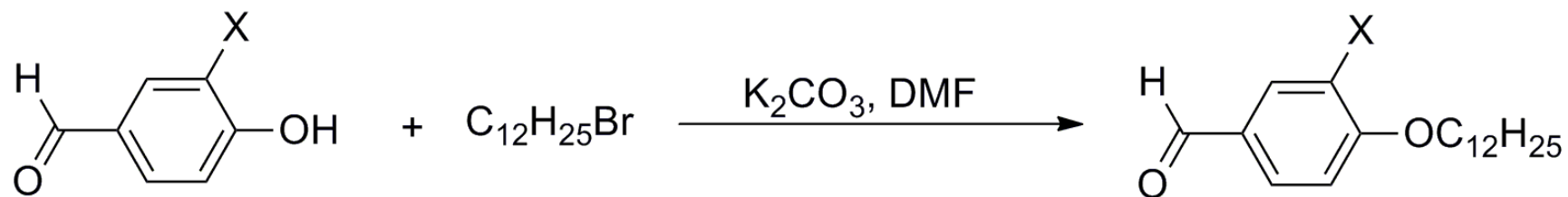
(1)



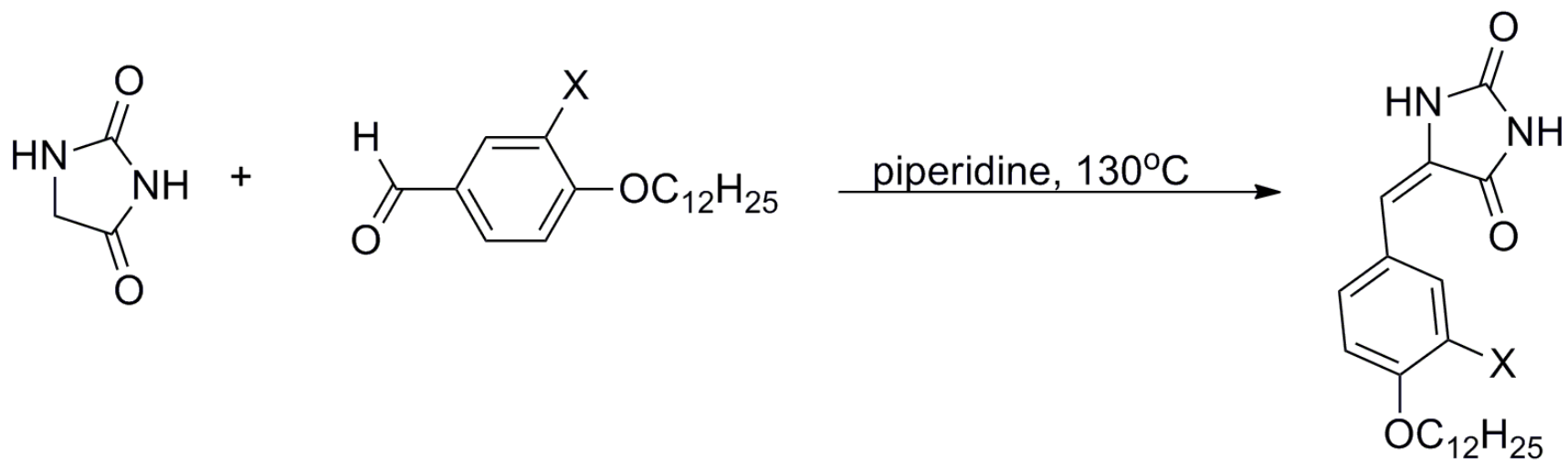
(2)

Strukturne formule ispitivanih jedinjenja

Sinteza (*E*)-5-(3-hlor-4-(dodeciloksi)benziliden)imidazolidin-2,4-diona (1) i (*E*)-5-(3-brom-4-(dodeciloksi)benziliden)imidazolidin-2,4-diona (2)

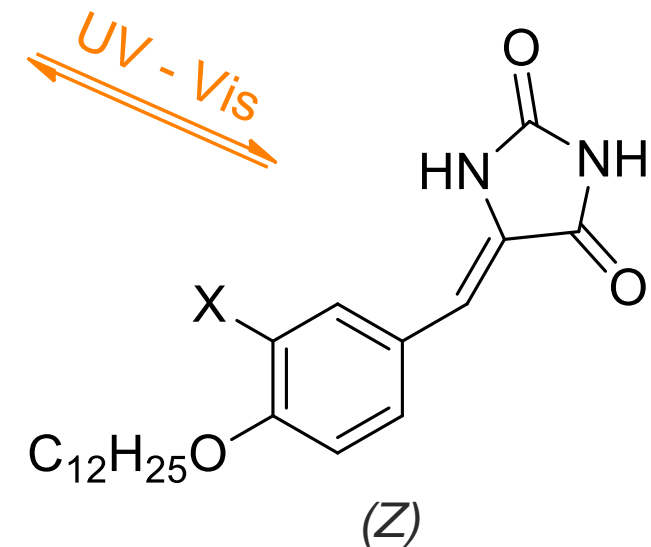
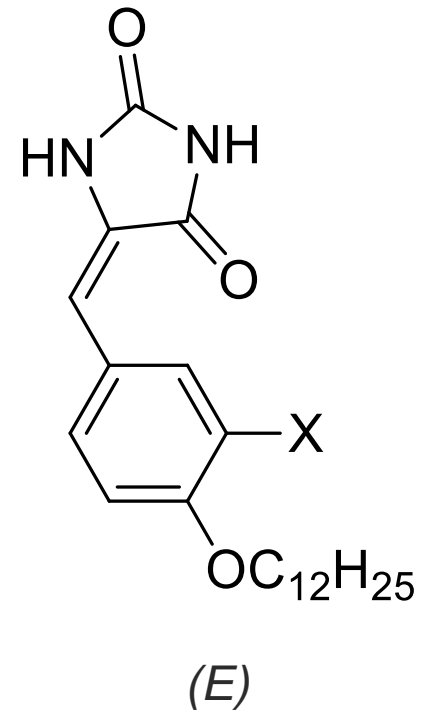
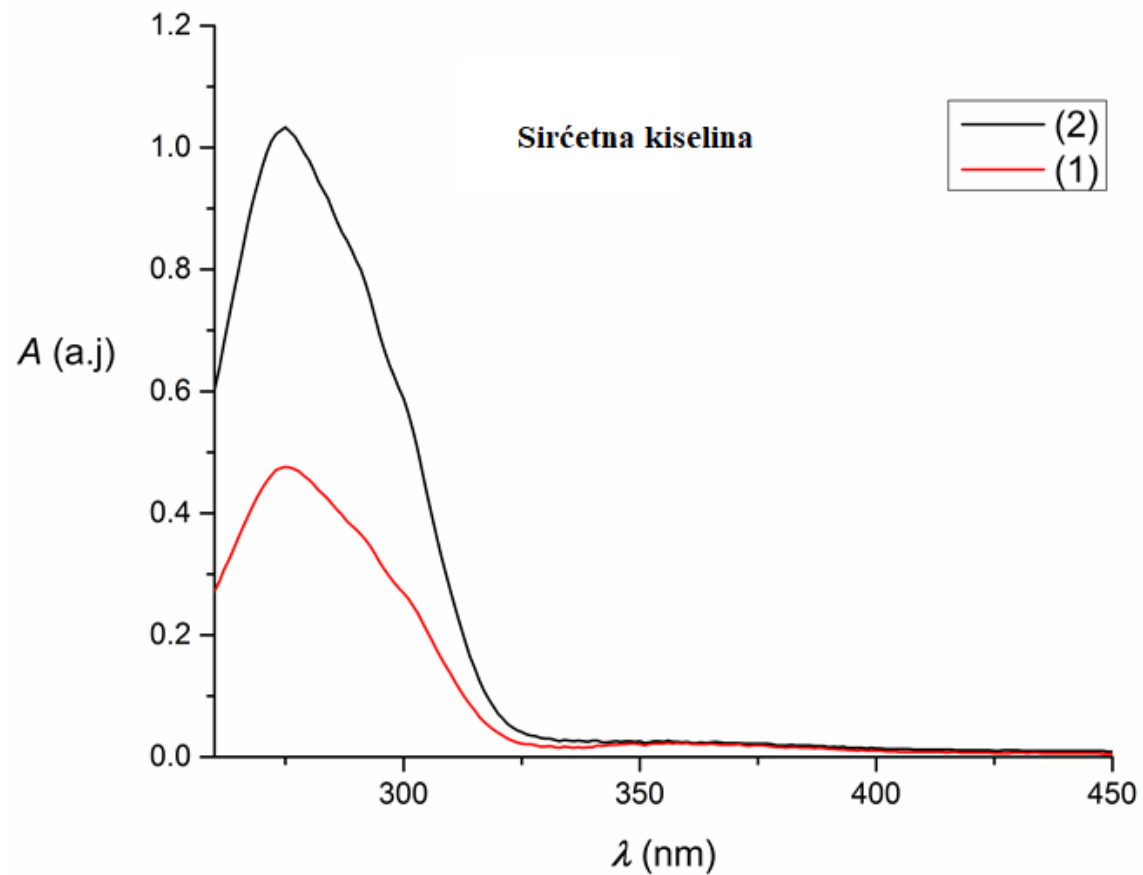


X = Cl, Br



Uticaj rastvarača na UV-Vis apsorpcione maksimume

Rastvarač	λ (nm)-(1)	λ (nm)-(2)
1. Sirćetna kiselina	275	276
2. Acetonitril	272	273
3. 1-Butanol	274	274
4. 2-Butanol	275	276
5. Hloroform	282	281
6. Dihlormetan	275	274
7. Diizopropil etar	271	274
8. 1,4-Dioksan	272	273
9. Dimetilformamid	274	274
10. Dimetilsulfoksid	272	275
11. Etilacetat	272	272
12. Etanol	275	274
13. 1-Propanol	275	276
14. Metil acetat	271	272
15. Metanol	274	273
16. 2-Metil-1-Propanol	274	274
17. N,N-Dimetilacetamid	274	273
18. N-Metilformamid	292	296
19. Terc-Butanol	274	275
20. Toluen	290	291



X = Cl, Br

Apsorpcioni spektri proučavanih jedinjenja u sirćetnoj kiselini

Primenjene višeparametarske jednačine Kamlet – Taft (1) i Katalan (2):

$$\nu_{max} = \nu_{max0} + a\alpha + b\beta + s\pi^* \quad (1)$$

$$\nu_{max} = \nu_{max0} + aSA + bSB + cSP + dSdP \quad (2)$$

A , SA – sposobnost rastvarača da bude donor protona u vodoničnoj vezi
 β , SB – sposobnost rastvarača da bude akceptor u vodoničnoj vezi
 π^* - polarizabilnost/ polarnost

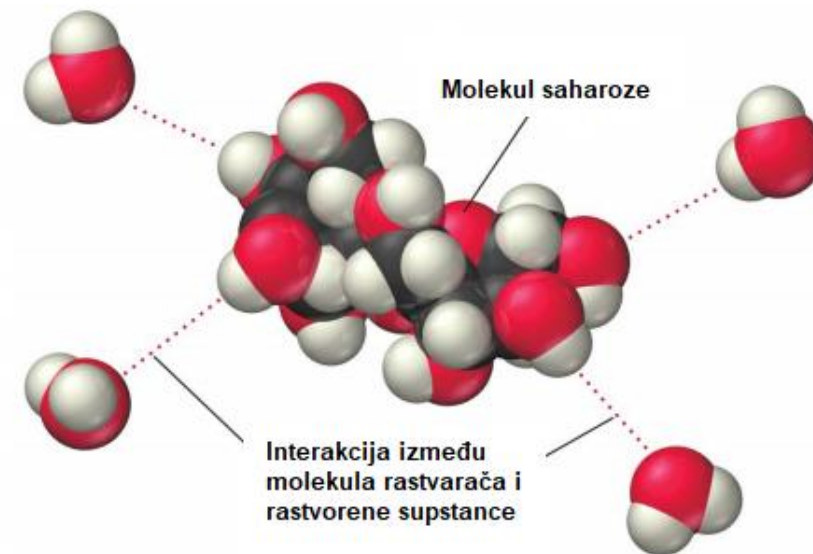
a , b , s , c , d – individualni doprinosi solvatohromnih efekata na UV-Vis apsorpcione frekvence

ν_{max0} - Apsorpciona frekvencija supstance u referentnom sistemu

ν_{max} - Apsorpciona frekvencija supstance u određenom rastvaraču

SP – polarizabilnost

SdP - polarnost



Preuzeto sa: <http://juliethahn.com/9-26M-BPC-JMH-TroGC-04-lecture-powerpoints.pdf>

Rezultati korelacija dobijeni na osnovu solvatohromne jednačine (1) i procentualni udeli solvatohromnih parametara:

No.	ν_0 (10^3cm^{-1})	s (10^3cm^{-1})	b (10^3cm^{-1})	a (10^3cm^{-1})	R^a	s^b	F^c	P_π (%)	P_β (%)	P_α (%)
1	33.52 (± 0.37)	2.13 (± 0.45)	1.45 (± 0.22)	0.84 (± 0.22)	0.954	0.221	27	48.19	32.81	19.00
2	33.30 (± 0.47)	1.86 (± 0.49)	1.96 (± 0.33)	0.76 (± 0.24)	0.928	0.266	17	40.61	42.79	16.59

Rezultati korelacija dobijeni na osnovu solvatohromne jednačine (2):

No.	ν_0 (10^3cm^{-1})	a (10^3cm^{-1})	b (10^3cm^{-1})	c (10^3cm^{-1})	d (10^3cm^{-1})	R^a	s^b	F^c
1	39.80 (± 1.24)	-7.12 (± 1.59)	1.63 (± 0.40)	0.92 (± 0.35)	-1.72 (± 0.47)	0.945	0.257	17
2	38.95 (± 0.85)	-6.67 (± 1.17)	1.73 (± 0.34)	1.78 (± 0.42)	-1.74 (± 0.43)	0.961	0.224	22

^a Korelacioni koeficijent; ^b standardna procena greške; ^c Fišerov (Fisher) koeficijent

Zaključak:

- Sintetisana su dva nova molekula koja sadrže hidantoinско jezgro i disupstituisanu fenil-grupu.
- Jedinjenja su u potpunosti okarakterisana sledećim spektroskopskim metodama: FTIR, ^1H NMR, ^{13}C NMR, UV-Vis spektroskopijom, elementarnom analizom i tankoslojnom hromatografijom.
- Višeparametarski modeli Kamlet-Tafta i Katalana obezbeđuju uvid u načine na koje proučavani molekuli uspostavljaju interakcije sa molekulima iz okruženja.
- Planirana istraživanja obuhvatiće ispitivanje njihovih tečnokristalnih svojstava i interakcije za polarizovanom svetlošću.

Hvala na pažnji!

