**Зависимость спектральных и агрегационных характеристик производных 3-(хинолин-2-илметилен)изоиндолин-1-она от количества и природы галогеновых заместителей**

***Шатило А.Г.1, А. А. Набасов1, Н. Е. Галанин1, С.Д. Усольцев1,2, Ю.С. Марфин1,2***

*Студент, 3 курс бакалаврита*

*1 ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет», Иваново, Россия*

*2 ФГБОУ ВО «Тихоокеанский Государственный Университет», Хабаровск, Россия*

*E-mail:* *ag.shatilo@mail.ru*

Одним из новых перспективных классов высокофлуоресцентных комплексов бора(III) являются борфторидные комплексы 3-(хинолин-2-илметилен) изоиндолин-1-она. Соединения данного класса обладают высокими квантовыми выходами флуоресценции и молекулярной экстинкции, наряду с простотой синтетической процедуры их получения [1]. Как для любого малоизученного класса соединений, критическим пунктом исследований является выявление взаимосвязи структура – свойство для установления возможных направлений дериватизации.

В работе исследовано влияние галогеновых заместителей (фтор, хлор, бром) на спектральные и агрегационные характеристики соединений. Для 4 производных 3-(хинолин-2-илметилен)изоиндолин-1-она предсказаны структурные и электронные характеристики соединений в основном и первом возбужденном электронном состояниях, исследован сольватохромный эффект, а также установлено влияние состава бинарных систем растворителей (ацетонитрил – вода и диметилсульфоксид – вода) на спектральные свойства для установления различий в протекании процесса агрегации.

Показано, что в исследованном ряду соединений агрегационные характеристики в значимой степени различаются. Кроме того, на протекание процесса агрегации оказывает влияние и выбор бинарной смеси: в системе ацетонитрил – вода, флуоресценция тушится на протяжении всего процесса, в то время как в системе диметилсульфоксид – вода, увеличение доли воды до начала процесса агрегации вызывает разгорание флуоресценции. Установлено, что пороговое значение концентрации воды в бинарной системе, провоцирующее агрегационные эффекты, увеличивается в последовательности QCl4 < QBr2 = QF4 < Q в смеси ацетонитрил – вода и в последовательности QBr2 = QCl4 < QF4 < Q в смеси диметилсульфоксид – вода.

Соединение QCl4 является таким образом перспективным сенсором воды в обсужденных органических растворителях. Наибольшей агрегационной устойчивостью, ассоциируемой с применимостью в биовизуализации обладает соединение без галогеновых заместителей. Кроме того, флуоресценция незамещенного 3-(хинолин-2-илметилен) изоиндолин-1-она также в наименьшей степени тушится при полной агрегации, это говорит об их наибольшем в исследованном ряду соединений потенциале в органической фотонике.

*Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 22-73-10167).*

**Литература**

1. Nabasov, A. A., Koptyaev, A. I., Usoltsev, S. D., Rumyantseva, T. A., Galanin, N. E. 2-Difluoroboryl-3-(quinolin-2-ylmethylene) isoindolin-1-one: Efficient Synthesis Method, TD-DFT Analysis and Electrical Properties of Thin Films // Macroheterocycles. – 2022. – Т. 15. – №. 2. – С. 128-132.
2. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 102nd Ed. / ed. Rumble J.R. Boca Raton, FL: CRC Press, 2021.