____ химия ___

УДК 547.791.1

Статья посвящается юбилею академика РАН Ирины Петровны Белецкой

Ү-СТРУКТУРИРОВАННЫЕ ФЛУОРОФОРЫ НА ОСНОВЕ N(2)-АРИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛОВ: СИНТЕЗ, ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ И ХЕМОСЕНСОРНЫХ СВОЙСТВ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ НИТРОАРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

© 2023 г. И. А. Лавринченко¹, Т. Д. Мосеев¹, М. В. Вараксин^{1,2,*}, Ю. А. Селезнев¹, Л. К. Садиева¹, Г. В. Зырянов^{1,2}, А. Н. Цмокалюк¹, академик РАН В. Н. Чарушин^{1,2}, академик РАН О. Н. Чупахин^{1,2,**}

Поступило 19.10.2022 г. После доработки 30.12.2022 г. Принято к публикации 16.01.2023 г.

Предложен пятистадийный метод синтеза Y-структурированных "push-pull" флуорофоров на основе 2-(4'-метоксифенил)-1,2,3-триазола, которые характеризуются эмиссией в диапазоне от 350 до 450 нм и высокими квантовыми выходами QY 90–99% в растворителях различной полярности. Определена возможность применения полученных соединений в качестве хемосенсоров для определения как ароматических, так и алифатических нитроаналитов в концентрациях от 300 млрд $^{-1}$.

Ключевые слова: флуорофоры, триазолы, хемосенсоры, нитроароматические соединения

DOI: 10.31857/S2686953522600702, EDN: CLZCVS

ВВЕДЕНИЕ

Органические "push-pull" флуорофоры представляют собой π -сопряженные системы, состоящие из электронодонорной и электроноакцепторной групп [1, 2]. Существует множество комбинаций подобных систем: $Д-\pi-A$, $A-\pi-Д-\pi-A$, $Д-\pi-A-\pi-Д$ и др. (где Д — электронодонорный фрагмент, π — сопряженная π -система связывания, A — электроноакцепторная часть) [3]. Внутри флуорофоров могут возникать различные эффекты: двойной внутримолекулярный перенос заряда, перенос электрона под действием излучения, флуоресцентный резонансный перенос энергии, увеличение флуоресцентных свойств за счет процессов хелатирования, эмиссия, индуци-

рованная агрегацией, внутримолекулярный перенос заряда (ВПЗ) и другие [4–6]. В настоящее время флуорофоры находят применение в различных областях, а именно: в аналитической химии в качестве люминесцентных сенсоров, производстве, биохимии (например, для биовизуализации и т.д.) [7–10].

Стоит отметить, что молекулы, характеризующиеся состоянием ВПЗ, широко используются при создании органических флуоресцентных хемосенсоров для определения различных аналитов. Одним из важных для обнаружения классов веществ, как с точки зрения их влияния на окружающую среду, так и с точки зрения общественной безопасности, являются нитроароматические соединения. Они, как известно, используются в производстве металлов, красителей и взрывчатых веществ, в результате чего накапливаются в почве, атмосфере и, в конечном итоге, негативно влияют на здоровье человека, вызывая различные патологии [11—13].

Для создания хемосенсоров в настоящее время чаще всего применяются разветвленные V-, X- и Y-структурированные флуорофоры (рис. 1). Стоит отметить, что последние (Y) могут быть реализованы как Д–Д–А или Д–А–Д системы, которые являются основой как высокоэффективных

¹Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина, 620002 Екатеринбург, Россия

²Институт органического синтеза имени И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук, Уральское отделение Российской академии наук, 620108 Екатеринбург, Россия

^{*}E-mail: m.v.varaksin@urfu.ru

^{**}E-mail: chupakhin@ios.uran.ru

X-структурированные X-структурированны

Рис. 1. Примеры известных V-, X- и Y-структурированных флуорофоров.

люминесцентных материалов, так и хемосенсоров [14–19].

Для создания Y-структурированных флуорофоров по типу Д-А-Д подходят структурные блоки на основе N(2)-1,2,3-триазола. Благодаря уникальному электронному строению и специфической геометрии данные молекулы используются в создании органических светодиодов, материалов для нелинейной оптики, флуоресцентных зондов, а также применяются в люминесцентных материалах в качестве π -линкеров или электроноакцепторной группы [20—22]. Кроме этого, стоит отметить легкость получения и функционализации этого класса соединений, что можно использовать для создания высокоэффективных синтетических схем [23, 24].

Настоящая работа посвящена разработке метода синтеза новых Y-структурированных флуорофоров на основе N(2)-1,2,3-триазола, а также исследованию возможностей применения полученных соединений в качестве хемосенсоров для определения нитроароматических соединений.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Целевые производные N(2)-1,2,3-триазола, которые представляют собой Ү-структурированные флуорофоры по типу Д-А-Д, синтезировали по схеме, включающей 5 стадий (схема 1). В качестве исходного соединения выбран пара-метоксифенилгидразин 1, который вводили в реакцию конденсации с оксимом 2-оксопропаналя, выдерживая в течение 6 ч в смеси 1,4-диоксана и воды. На второй стадии интермедиат 2 циклизуется в пиридине под действием сульфата меди с образованием *п*-метоксиарил-1,2,3-триазола 3 с общим выходом 65% по итогам двух стадий [25]. Дальнейшая стадия бромирования протекает региоселективно по орто-положениям относительно метокси-группы, давая соединение 4 с высоким выходом (96%). Ключевая стадия построения флуорофорной системы 5a-c — каталитическое сочетание арилдигалогенида 4 с соответствующими бороновыми кислотами по реакции Сузуки—Мияуры, протекающее в смеси 1,4-диоксан/вода в присутствии $Pd(Ph_3)_4$, K_3PO_4 [26]. Дальнейшее дезоксигенирование под действием цинковой пыли в насыщенном растворе NH_4Cl приводило к образованию целевых Y-структурированных флуорофоров 6 [27].

Таким образом, по схеме 1 были синтезированы 3 новых соединения **ба**—**c**, в структуре которых содержатся фрагменты замещенных карбазолов и третичных аминов. Полученные соединения можно рассматривать в качестве Y-флуорофоров с двумя донорными и одним акцепторным фрагментом (по типу Д—А—Д). Строение всех соединений установлено на основании данных ЯМР- и ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии и элементного анализа (спектры ЯМР представлены в дополнительных материалах).

Для всех полученных соединений зарегистрированы спектры абсорбции (табл. 1), эмиссии, определены квантовые выходы, а также проведено сравнение свойств соединений 5 и 6 (спектры абсорбции всех соединений представлены в дополнительных материалах). Спектры поглощения содержат два пика в области 290-300 и 325-345 нм. вероятнее всего, соответствующие $\pi \to \pi^*$ -переходу, что подтверждается высокими значениями молярных коэффициентов поглощения (во всех случаях $\varepsilon > 7000$) (рис. 3). Стоит отметить, что сильных сдвигов максимумов полос поглощения не наблюдается. Все спектры абсорбции были получены для концентрации $C = 1 \times 10^{-5} \,\mathrm{M}$ и характеризуются интенсивностью 0.2-0.6. Исключение составляет соединение 6b, интенсивность спектров поглощения которого находится в диапазоне от 0.1 до 0.2.

Спектры эмиссии (табл. 2) соединений **5а** и **6а-с** содержат уширенные пики в диапазоне от 350 до 450 нм для всех соединений, что соответствует фиолетово-голубой области видимого спектра (рис. 4) (спектры эмиссии всех соединений представлены в дополнительных материа-

Схема 1. Синтез Y-структурированных флуорофоров на основе 1,2,3-триазола.

Рис. 2. Полученные Y-структурированные флуорофоры на основе N(2)-арил-1,2,3-триазола. Выходы соединений **6а**—**c** указаны за 5 стадий.

лах). Вероятнее всего, это связано с явлением внутримолекулярного переноса заряда благодаря наличию в данных молекулах донорного и акцепторного фрагментов. Однако для соединения **6c** наблюдалось два пика эмиссии в области 360—380 нм, что, скорее всего, можно объяснить преобладанием состояния локального возбуждения над внутримолекулярным переносом заряда.

Для более полной оценки фотофизических свойств флуорофоров были измерены абсолютные квантовые выходы флуоресценции (QY) (табл. 3). Стоит отметить, что для соединений **5а**–**c**, содержащих N-оксидную группу, QY < 0.1%.

В свою очередь, фотоактивные молекулы 6, которые не содержат данную группу, характеризуются высокими значениями QY — от 90 до 99%; при этом квантовый выход не зависит от полярности растворителя.

Для исследования разницы в квантовых выходах полученных соединений были рассчитаны энергии молекулярных орбиталей, а также возможные переходы электронов в возбужденном состоянии [configuration interaction with single excitations method (CI-Singles), или CIS] для соединений **5c** и **6c**. Установлено, что для молекулы **6c** наиболее вероятные переходы между энергетиче-

Таблица 1. Длины волн поглощения исследуемых флуорофоров **6**

Соединение	Длина волны, нм					
	Толуол	ТГФ	MeCN	ДМСО	МеОН	
6a	339	338	337	338	327	
6b	324	318	314	318	314	
6c	299	298	298	299	297	
5a	344	340	335	340	339	

Таблица 2. Длины волн эмиссии исследуемых флуорофоров **6**

Соединение	Длина волны λ, нм					
Соединение	Толуол	ТГФ	MeCN	ДМСО	MeOH	
6a	384	399	419	428	444	
6b	360, 375	361, 374	382	384	391	
6c	367, 384	367, 383	369, 383	373, 387	384	
5a	386	401	426	423	442	

скими уровнями возможны в $S_0 \rightarrow S_1$ (f = 0.3396) и $S_0 \rightarrow S_3$ (f = 0.4773) состояниях, при этом наблюдаются переходы НОМО \rightarrow LUMO и НОМО-1 \rightarrow LUMO. Такие переходы возможны из-за того, что орбитали НОМО и НОМО-1 локализованы на двух эквивалентных фрагментах карбазола и разница между ними составляет около 0.03 эВ. В свою очередь, для флуорофора **5c** наиболее вероятным переходом является состояние

Поглощение 0.6 6a 0.4 6b 6c 0.2 0 300 350 400 450 500 550 600 Длина волны, нм

Рис. 3. Спектры поглощения для соединений **5а** и **6а**—с. Пробоподготовка: $C=1\times 10^{-5}~{\rm M}~{\rm B}~{\rm MeCN}$ при комнатной температуре.

 $S_0 \rightarrow S_3$ (f= 0.3679), в котором разрешен только переход HOMO-1 \rightarrow LUMO, а HOMO \rightarrow LUMO запрещен (энергии молекулярных орбиталей и оптимизированные координаты представлены в дополнительных материалах). Также при изучении структуры было выявлено изменение геометрии молекул, в частности у флуорофора $\mathbf{5c}$ триазольный цикл развернут по отношению к фенильному циклу, в то время как в молекуле $\mathbf{6c}$ они находятся в одной плоскости. Кроме этого, наличие отрицательного заряда, обусловленного атомом кислорода \mathbf{N} -оксидной группы, изменяет распределение зарядов в молекулах (рис. $\mathbf{5}$) [$\mathbf{28}$ — $\mathbf{34}$].

Таким образом, наличие N-оксидной группы в молекуле Y-структурированных флуорофоров не только изменяет зарядовую плотность, но и существенно меняет геометрию молекулы, что в совокупности приводит к затруднению переходов электронов и, как следствие, резкому падению квантовых выходов флуоресценции.

Для изучения свойств флуорофоров **6а**—**c** было проведено их исследование как потенциальных хемосенсоров для детектирования нитросодержащих взрывчатых веществ посредством тушения флуоресценции. В качестве тушителей были выбраны электронодефицитные нейтральные молекулы, одни из самых распространенных взрывчатых веществ и продукты их распада, причем как нитроароматические [2,4-динитротолуол (ДНТ), 2,4,6-тринитротолуол (ТНТ)], так и алифатический тетранитропентаэритрит (ТЭН).

Сенсорный отклик флуорофоров **6а-с** по отношению к нитроаналитам проявлялся в тушении их флуоресценции и количественно оцени-

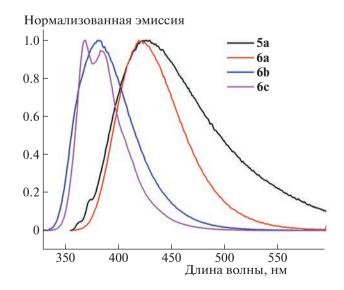


Рис. 4. Нормализованные спектры эмиссии для соединений **5a** и **6a–c**. $\lambda_{\rm ex}$ (**5a**) = 335 нм, $\lambda_{\rm ex}$ (**6a**) = 337 нм, $\lambda_{\rm ex}$ (**6b**) = 314 нм, $\lambda_{\rm ex}$ (**6c**) = 298 нм. Пробоподготовка: $C = 1 \times 10^{-5}$ М в MeCN при комнатной температуре.

вался с использованием модели статического тушения Штерна $-\Phi$ ольмера в соответствии с уравнением (1):

$$\frac{I_0}{I} = 1 + K_{SV} \times [Q], \tag{1}$$

где I_0 и I — интенсивности флуоресценции в отсутствие и в присутствии тушителя соответственно; [Q] — концентрация тушителя; $K_{\rm SV}$ — константа тушения (статическая) Штерна—Фольмера.

Все три флуорофора $6\mathbf{a}$ — \mathbf{c} показали сходный сенсорный отклик на присутствие нитросодержащих взрывчатых веществ; константы тушения флуоресценции Штерна—Фольмера варьируются в пределах $(5.24-10.36) \times 10^3 \,\mathrm{M}^{-1}$ (табл. 4). Наилучший результат продемонстрировал флуорофор $6\mathbf{c}$ — в присутствии ДНТ константа тушения

Таблица 3. Абсолютные квантовые выходы QY люминесценции исследуемых флуорофоров

Соединение	Квантовый выход QY, %					
	Толуол	ТГФ	MeCN	ДМСО	MeOH	
5a	< 0.1	< 0.1	<0.1	<0.1	<0.1	
6a	95	99	99	99	91	
6b	90	99	99	99	99	
6c	99	99	99	99	99	

флуоресценции Штерна—Фольмера достигла значения $1.04 \times 10^4 \,\mathrm{M}^{-1}$, предел обнаружения составил 278 ppb (табл. 4). Следует отметить, что все графики тушения флуоресценции Штерна—Фольмера являются линейными ($R^2 \ge 0.97$), что

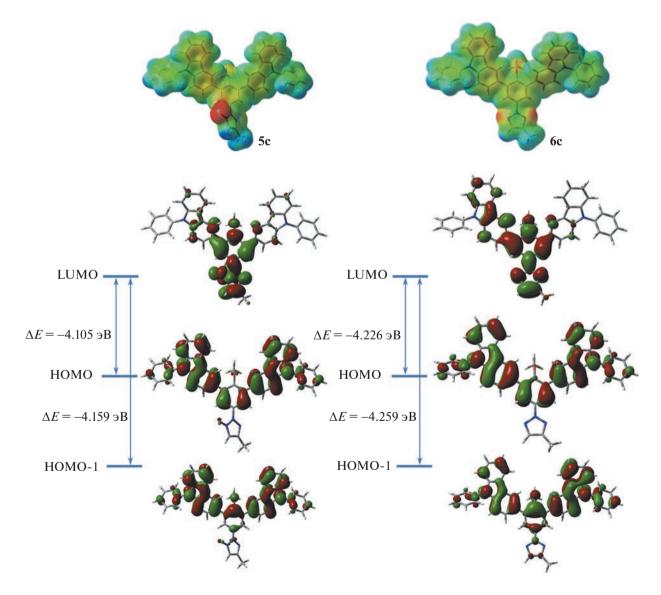


Рис. 5. Электростатический потенциал и визуализация молекулярных орбиталей для флуорофоров 5с и 6с.

ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ХИМИЯ, НАУКИ О МАТЕРИАЛАХ том 512 2023

	-					
Флуорофор	K_{SV} , M^{-1}			Предел обнаружения, млрд $^{-1}$		
	ДНТ	THT	ТЭН	ДНТ	THT	ТЭН
6a	8.04×10^{3}	5.24×10^{3}	7.14×10^{3}	303	276	538
6b	7.78×10^{3}	6.26×10^{3}	5.49×10^{3}	284	307	453
6c	1.04×10^4	7.54×10^{3}	5.53×10^{3}	278	371	631

Таблица 4. Константы тушения флуоресценции Штерна—Фольмера $K_{\rm sv}$ исследуемых флуорофоров и предел обнаружения нитроаналитов

свидетельствует о преобладании только одного механизма тушения, предположительно статического, при низких концентрациях тушителя (рис. 6).

Известно, что при истинно-статическом механизме тушения происходит формирование неизлучающих комплексов "хемосенсор: тушитель" в невозбужденном или основном состоянии, что может быть зафиксировано как появление дополнительных пиков в спектрах поглощения [35]. При этом время жизни флуоресценции хемосенсора остается неизменным и не зависит от концентрации тушителя в растворе. При динамическом механизме, напротив, образования устойчивых комплексов "хемосенсор: тушитель" не происходит, при этом время жизни флуоресценции хемосенсора уменьшается с ростом концентрации тушителя в растворе. Поэтому для более подробного изучения механизма тушения были дополнительно проведены фотометрическое титрование и времяразрешенное флуориметрическое титрование (рис. 7). В качестве объектов для исследования были выбраны флуорофор 6с и тушитель-нитроаналит ДНТ как комбинация, показавшая наилучшие результаты в экспериментах по флуориметрическому титрованию.

В наших экспериментах при добавлении нитротушителя к раствору хемосенсора появления дополнительных пиков в спектрах поглощения обнаружено не было (рис. 7а), что исключает воз-

можность истинно-статического механизма тушения. Но одновременно с этим время жизни флуоресценции соединения **6c** также не менялось (рис. 7б,в), что исключает вероятность и истинно-динамического механизма тушения (остальные графики по флуорметрическому титрованию представлены в дополнительных материалах). В связи с вышеизложенным нами была принята модель псевдостатического тушения [36].

В данном исследовании флуорофоры **6а**—**с** показали себя как эффективные хемосенсоры для детектирования нитросодержащих взрывчатых веществ, причем не только ароматического ряда (таких как ДНТ и ТНТ), но и алифатического (ТЭН). По нашему мнению, полученные соединения перспективны для практического применения в связи с имеющимися на сегодня трудностями обнаружения ТЭН обычными методами или с привлечением специально обученных собак.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Методы. Спектры 1 H, 13 C ЯМР регистрировали на спектрометре "Bruker Avance II" (400 МГц) или "Bruker Advance III" (600 МГц) в CDCl₃ (7.26 м. д. для ядер 1 H, 77.16 м. д. для ядер 13 C). Химические сдвиги приведены в δ -шкале относительно внутреннего стандарта SiMe₄ в миллионных долях (м. д.). Все углеродные спектры запи-

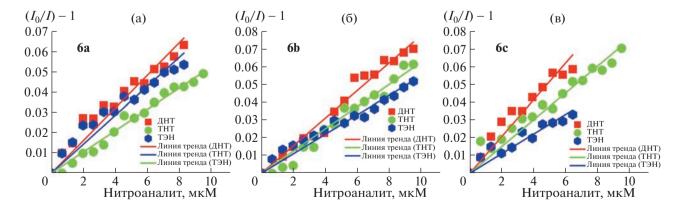


Рис. 6. Графики Штерна—Фольмера тушения флуоресценции флуорофоров $\mathbf{6a}$ (a), $\mathbf{6b}$ (б), $\mathbf{6c}$ (в) в присутствии различных нитро-содержащих тушителей в ацетонитриле.

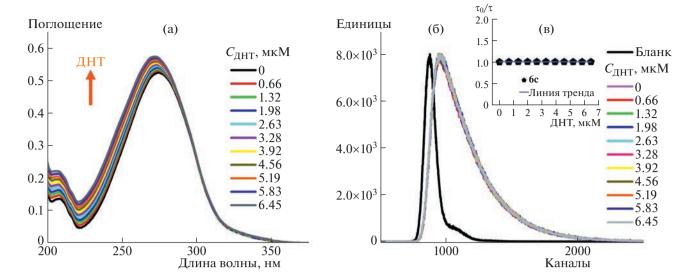


Рис. 7. Фотометрическое титрование флуорофора **6c** ДНТ (а); двумерные профили затухания флуоресценции для **6c** (б) и графический результат времяразрешенного измерения тушения флуоресценции **6c** методом TCSPC (в) при добавлении ДНТ, зарегистрированные на $\lambda_{\rm Em} = 369$ нм.

саны с развязкой на ядрах ¹Н. Все константы спин-спинового взаимодействия приведены в Герцах (Гц). Следующие сокращения были использованы для описания структуры пиков: с — синглет, д — дублет, т — триплет, дд — дублет дублетов, м — мультиплет, уш. с — уширенный синглет и т.д.

Масс-спектры регистрировали на масс-спектрометре Shimadzu GCMS-QP2010 Ultra с системой ионизации образцов электронным ударом (EI) или Shimadzu LCMS-2010. ИК-спектры (4000—400 см⁻¹) регистрировали с помощью Фурье-спектрометра, снабженного приставкой диффузного отражения. Элементный анализ (C, H, N, Br) выполнен на анализаторе "Perkin Elmer 2400-II".

Спектры поглощения ультрафиолетового излучения регистрировали на спектрофотометре PerkinElmer (Lambda 45). Спектры возбуждения и эмиссии регистрировали на спектрофлуориметре Horiba FluoroMax-4. Абсолютный квантовый выход определяли при помощи интегрирующей сферы. Все измерения проводились примерно при концентрации ($C = 1 \times 10^{-5}$ M).

4-Метоксифенилгидразина гидрохлорид, этилацетоацетат, тетракис(трифенилфосфин)палладий (0), [4-(дифениламино)фенил]бороновая кислота, [4-(9*H*-карбазол-9-ил)фенил]бороновая кислота, (9-фенил-9*H*-карбазол-3-ил)бороновая кислота приобретены у коммерческих поставщиков.

Оксим 2-оксопропаналя синтезировали по литературной методике [1].

Растворители для оптических исследований — толуол, MeCN, ТГФ, MeOH, ДМСО — приобре-

тались степени чистоты "ч." или "ос. ч." и использовались без дополнительной очистки.

Общая методика синтеза 2-(2-арилгидразоно) пропанальоксима 2. В круглодонной колбе (250 мл) растворяли гидрохлорид гидразина (0.0594 моль, 1 экв.) в H_2O (15 мл) и нейтрализовали 10% раствором $NaHCO_3$ до значения рН 6—7. Затем добавляли 2-оксопропанальоксим (0.0594 моль, 1 экв.), растворенный в 1,4-диоксане (10 мл), и перемешивали при комнатной температуре в течение 6 ч. Выпавший осадок отфильтровывали и сушили на воздухе, а затем направляли на следующую стадию.

Общая методика синтеза 4-метил-2-арил-2H-1.2.3-триазол-1-оксида 3. Соединение 2 (0.00594 моль, 1 экв. 1.23 г) растворяли в пиридине (13 мл) и в течение 15 мин добавляли раствор CuSO₄ (CuSO₄ · 5H₂O, 0.00891 моль, 1.5 экв., 2.22 г в 30 мл Н₂О). Через 8 ч реакцию подкисляли НС1 до pH 1-2, экстрагировали дихлорметаном (ДХМ) (3×50 мл), сушили над Na_2SO_4 и упаривали в вакууме. Получен порошок коричневого цвета, выход 565 мг (45%), $T_{\text{пл}} = 108-113$ °C, $R_f = 0.3$ (гексан/EtOAc, 9 : 1). 1 Н ЯМР (CDCl₃, 400 МГц, δ , м. д.): 7.70 (д, Ј 8.6 Гц, 2Н), 7.21 (с, 1Н), 6.95 (д, J 8.4 Гц, 2H), 3.79 (c, 3H), 2.26 (c, 3H). ¹³C{¹H} ЯМР (CDCl₃, 100 МГц, δ, м. д.): 159.9, 141.8, 127.8, 125.2. 116.5. 114.1. 55.5. 12.2. ИК (DRA), см⁻¹: 3107. 3079, 3005, 2972, 2904, 2836, 1605, 1587, 1525, 1505, 1453, 1402, 1377, 1338, 1300, 1248, 1168, 1109, 1046, 1011, 983, 830, 806, 781, 690, 662, 633, 600, 586, 524, 509. Масс-спектр (EI), m/z: 205 [M]⁺. Найдено, %: С, 58.49; Н, 5.62; N, 20.61. Вычислено для C₁₀H₁₁N₃O₂, %: C, 58.53; H, 5.40; N, 20.48.

Общая методика синтеза 2-(3,5-дибром-4-ме*токсифенил*)-4-метил-2*H*-1,2,3-триазола **4**. Соединение **3** (0.0067 моль, 1 экв.) растворяли в СНСІ₃ (10 мл) и добавляли Na₂CO₃ (0.01742 моль, 2.6 экв., 1.84 г) в H₂O (15 мл). Затем в течение 25 мин медленно добавляли Br₂ (0.0536, 8 экв., 2.76 мл). Через 6 ч реакционную смесь промывали H_2O (4 × 200 мл), органическую фазу сушили над Na₂SO₄ и упаривали в вакууме. Получен порошок коричневого цвета, выход 565 мг (45%), $T_{\pi\pi} =$ = $108-113^{\circ}$ C, $R_f = 0.3$ (rekcah/EtOAc, 9:1). ¹H AMP (CDCl₃, 400 МГц, δ, м. д.): 8.06–8.01 (м, 1H), 7.85 (дд, J 8.9, 2.6 Гц, 1H), 6.98 (д, J 8.9 Гц, 1H), 3.94 (c, 3H), 2.34 (c, 3H). ¹³С{¹H} ЯМР (CDCl₃, 100 МГц, δ, м. д.): 156.6, 142.6, 128.8, 128.2, 123.5, 111.8, 111.5, 106.0, 56.7, 12.3. ИК (DRA), см⁻¹: 3072, 2936, 1732, 1577, 1511, 1453, 1439, 1401, 1349, 1300, 1279, 1247, 1191, 1169, 1151, 1083, 1066, 1050, 1012, 868, 826, 797, 721, 704, 666, 633, 612, 560, 516. Maccспектр (EI), m/z: 360 [M]⁺. Найдено, %: C, 33.20; H, 2.61; N, 11.67. Вычислено для $C_{10}H_9Br_2N_3O_2, \%$: C. 33.09; H. 2.50; Br. 44.02; N. 11.58.

Общая методика синтеза 3,5-диарил-4-метил-2H-1,2,3-триазол-1-оксида $\mathbf{5a}$ — \mathbf{c} . Соединение $\mathbf{4}$ (0.00037 моль, 1 экв.), тетракис(трифенилфосфин)палладий (0.000015 моль, 0.04 экв., 17 мг), K_3PO_4 (0.00185 моль, 5 экв., 0.4 г) и бороновую кислоту (0.00112 моль, 3 экв.) растворяли в 12 мл смеси 1,4-диоксан/ H_2O (1 : 1 (об.)) и кипятили с обратным холодильником при $110^{\circ}C$ (масляная баня) в течение 6 ч. После этого добавляли H_2O (100 мл), реакционную массу экстрагировали $CHCl_3$ (3 × 50 мл), сушили над Na_2SO_4 и упаривали в вакууме. Желаемое соединение выделяли с помощью ручной колоночной хроматографии с использованием смеси гексан/EtOAc (9 : 1 (об.)) в качестве элюента.

2-(4,4"-Бис(дифениламино)-2'-метокси-[1,1':3',1"терфенил]-5-ил)-4-метил-2H-1,2,3-триазол-1-оксид 5а. Порошок светло-коричневого цвета, выход 190 мг (70%), $T_{\text{пл}} = 150 - 155$ °C, $R_f = 0.3$ (гексан/EtOAc, 9:1). ¹H ЯМР (CDCl₃, 400 МГц, δ, м. д.): 7.89–7.87 (M, 1H), 7.87–7.84 (M, 1H), 7.79–7.74 (M, 2H), 7.50-7.44 (M, 2H), 7.36-7.24 (M, 8H), 7.18-7.14 (M, 10H), 7.12-7.11 (M, 1H), 7.11-7.07 (M, 4H),7.05-7.02 (M, 2H), 3.90 (c, 3H), 2.52 (c, 3H). ¹³C{¹H} ЯМР (CDCl₃, 100 МГц, δ, м. д.): 156.8, 148.6, 147.8, 147.3, 147.2, 140.3, 131.2, 131.0, 130.4, 129.5, 129.3, 128.9, 128.4, 126.2, 125.8, 125.2, 124.6, 123.7, 123.6, 123.2, 123.0, 122.4, 118.9, 111.3, 56.0, 13.8. ИК (DRA), cm^{-1} : 3059, 3035, 2934, 2836, 2243, 1941, 1860, 1726, 1587, 1539, 1512, 1483, 1315, 1264, 1192, 1177, 1133, 1073, 1039, 1023, 1001, 904, 834, 805, 752, 725, 691, 644, 615, 573. Macc-спектр (EI), *m/z*: 691 [M]⁺. Найдено, %: С, 79.79; H, 5.59; N, 10.17. Вычислено для $C_{46}H_{37}N_5O_2$, %: C, 79.86; H, 5.39; N, 10.12.

2-(4,4"-Ди(9Н-карбазол-9-ил)-2"-метокси- $[1, 1':3', 1''-mep\phienun]-5'-un)-4-memun-2H-1, 2, 3$ *триазол-1-оксид* **5b**. Порошок светло-желтого цвета, выход 165 мг (65%), $T_{пл} = 230-235$ °C, $R_f = 0.3$ (гексан/EtOAc, 9 : 1). ¹H ЯМР (CDCl₃, 400 МГц, δ, м. д.): 8.19–8.16 (м, 6H), 8.06–8.05 (м, 1H), 8.01-7.99 (M, 1H), 7.86-7.84 (M, 2H), 7.78-7.76 (M, 2H), 7.65-7.63 (M, 2H), 7.53-7.50 (M, 4H),7.46-7.43 (м, 4H), 7.33-7.30 (м, 4H), 7.20 (д, J 8.9 Гц, 1H), 4.00 (c, 3H), 2.65 (c, 3H). ${}^{13}C\{{}^{1}H\}$ MMP (CDCl₃, 100 МГц, δ, м. д.): 157.0, 141.0, 140.8, 140.7, 138.5, 137.1, 136.4, 131.2, 130.5, 129.6, 128.4, 127.3, 126.8, 126.5, 126.2, 126.1, 125.4, 124.9, 124.4, 123.7, 123.6, 120.5, 120.4, 120.1, 111.6, 110.1, 109.9, 56.2, 13.9. ИК (DRA), cм⁻¹: 3044, 3022, 1897, 1598, 1545, 1518, 1496, 1449, 1334, 1313, 1266, 1222, 1171, 1139, 1104, 1070, 1007, 928, 913, 887, 831, 821, 805, 746, 722, 630, 606, 567, 528, 504. Macc-спектр (EI), m/z: 687 [M]⁺. Найдено, %: С, 80.31; H, 4.86; N, 10.20. Вычислено для, %: С₄₆Н₃₃N₅O₂: С, 80.33; Н, 4.84; N, 10.18.

2-(4-Метокси-3,5-бис(9-фенил-9H-карбазол-3ил)фенил)-4-метил-2H-1,2,3-триазол 1-оксид 5c. Порошок светло-коричневого цвета, выход 153 мг (60%), $T_{\text{пл}} = 165-170^{\circ}\text{C}$, $R_f = 0.3$ (гексан/EtOAc, 9:1). ¹H ЯМР (CDCl₃, 400 МГц, δ, м. д.): 8.80— 8.72 (м, 1Н), 8.40-8.31 (м, 1Н), 8.20 (дд, *J* 12.1, 7.8 Гц, 2Н), 8.03-8.01 (м, 1Н), 7.96 (дд, J 8.8, 2.7 Гц, 1Н), 7.88 (дд, *J* 8.6, 1.7 Гц, 1Н), 7.67–7.65 (м, 1Н), 7.64-7.61 (M, 4H), 7.61-7.58 (M, 4H), 7.54-7.53 (M,1H), 7.52-7.48 (M, 2H), 7.47-7.42 (M, 5H), 7.35-7.33 (м, 1H), 7.32–7.29 (м, 1H), 7.17 (д, J 8.9 Γ ц, 1H), 3.93 (c, 3H), 2.61 (c, 3H). ¹³C{¹H} 9MP (CDCl₃, 100 МГц, δ, м. д.): 171.3, 157.1, 141.5, 141.3, 141.1, 140.7, 140.4, 137.8, 137.4, 132.3, 130.1, 130.0, 129.2, 128.5, 128.0, 127.9, 127.6, 127.2, 127.2, 127.0, 126.7, 126.6, 126.1, 126.1, 123.9, 123.7, 123.6, 123.5, 123.3, 121.5, 120.8, 120.6, 120.6, 120.1, 117.5, 111.4, 110.1, 109.9, 109.4, 56.2, 13.8. ИК (DRA), см⁻¹: 3850, 3057, 2959, 2929, 2834, 2331, 2241, 1866, 1714, 1625, 1595, 1500, 1425, 1417, 1360, 1328, 1298, 1254, 1229, 1179, 1124, 1105, 1072, 1020, 903, 883, 801, 761, 745, 725, 694, 660, 631, 604, 545. Macc-спектр (EI), *m/z*: 687 [М]+. Найдено, %: С, 80.38; Н, 4.97; N, 10.27. Вычислено для $C_{46}H_{33}N_5O_2$, %: C, 80.33; H, 4.84; N, 10.18.

Общая методика синтеза 3,5-диарил-4-метил-2H-1,2,3-триазола $\mathbf{6a}$ - \mathbf{c} . Соответствующий три-азол-N-оксид $\mathbf{5a}$ - \mathbf{c} (0.00023 моль, 1 экв.) растворяли в 20 мл смеси ТГФ/ H_2 О (1 : 1 (об.)). Затем добавляли Zn (пыль, 0.00115 моль, 5 экв.) и NH₄Cl (насыщенный раствор, 20 мл). Реакционную смесь грели на масляной бане при 70° С в течение 4 ч. После этого реакционную смесь экстрагиро-

вали ДХМ (3 × 40 мл), сушили над Na_2SO_4 и упаривали в вакууме.

2-Метокси-5-(4-метил-2H-1,2,3-триазол-2-ил)-N4,N4,N4',N4''-тетрафенил-[1,1':3',1''-терфенил]-4,4'-диамин ба. Порошок светло-коричневого цвета, выход 152 мг (98%), $T_{пл} = 155-160$ °C, $R_f = 0.3$ (гексан/EtOAc, 9 : 1). ¹H ЯМР (CDCl₃, 400 МГц, δ, м. д.): 8.07 (д, J 2.8 Гц, 1Н), 7.96 (дд, J 8.9, 2.7 Гц, 1H), 7.67–7.65 (м, 2H), 7.52–7.49 (м, 2H), 7.30–7.26 (M, 8H), 7.17–7.13 (M, 11H), 7.12 (c, 1H), 7.07–7.02 (M, 5H), 3.89 (c, 3H), 2.57 (c, 3H). ¹³C{¹H} ЯМР (CDCl₃, 100 МГц, δ, м. д.): 155.5, 147.9, 147.9, 147.6, 147.1, 145.9, 142.1, 133.9, 131.7, 131.0, 130.5, 130.3, 129.5, 129.4, 128.6, 128.2, 125.2, 124.8, 124.6, 123.5, 123.3, 123.3, 123.0, 121.1, 118.2, 111.6, 56.1, 29.8. ИК (DRA), см⁻¹: 3597, 3061, 3034, 2954, 2918, 2849, 2782, 2244, 1940, 1859, 1792, 1720, 1586, 1535, 1514, 1484, 1409, 1377, 1327, 1263, 1176, 1153, 1136, 1098, 1073, 1044, 1024, 970, 905, 835, 810, 751, 727, 691, 645, 616, 554, 505. Macc-cnextp (EI), m/z: 675 [M]⁺. Найдено, %: C, 81.85; H, 5.58; N, 10.39. Вычислено для $C_{46}H_{37}N_5O$, %: C, 81.75; H, 5.52: N. 10.36.

9,9-(2'-метокси-5'-(4-метил-2H-1,2,3-триазол-2-ил)-[1,1':3',1"-терфенил]-4,4"-диил)бис(9Н-карбазол) 6b. Порошок светло-коричневого цвета, выход 153 мг (99%), $T_{пл} = 120 - 125$ °C, $R_f = 0.3$ (гексан/EtOAc, 9:1). ¹H ЯМР (CDCl₃, 400 МГц, δ, м. д.): 8.24-8.11 (M, 4H), 7.97-7.92 (M, 2H), 7.87-7.84 (M, 1H), 7.76-7.71 (M, 3H), 7.63-7.45(M, 11H),7.39–7.32 (M, 5H), 3.98 (c, 3H), 2.71 (c, 3H). ¹³C{¹H} ЯМР (CDCl₃, 100 МГц, δ, м. д.): 155.7, 142.5, 140.7, 138.4, 137.6, 136.2, 131.0, 130.9, 129.5, 128.7, 127.3, 126.6, 126.1, 126.0, 125.9, 125.2, 124.8, 124.2, 123.5, 123.4, 120.4, 120.3, 119.9, 111.8, 109.9, 109.8. 59.1. 14.1. ИК (DRA), см⁻¹: 3423, 3057, 2957. 2925, 2853, 2363, 1921, 1722, 1597, 1519, 1493, 1477, 1448, 1360, 1333, 1315, 1260, 1225, 1170, 1134, 1118, 1071, 1039, 1015, 972, 905, 836, 810, 746, 720, 622, 553, 527. Macc-спектр (EI), m/z: 671 [M]⁺. Найдено, %: С, 82.36; Н, 4.91; N, 10.48. Вычислено для C₄₆H₃₃N₅O, %: C, 82.24; H, 4.95; N, 10.42; O, 2.38.

3,3'-(2-Метокси-5-(4-метил-2H-1,2,3-триазол-2-ил)-1,3-фенилен)бис(9-фенил-9H-карбазол) **6с**. Порошок светло-коричневого цвета, выход 151 мг (98%), $T_{\Pi\Pi}=160-165^{\circ}$ С, $R_f=0.3$ (гексан/EtOAc, 9:1). 1 H ЯМР (CDCl $_3$, 400 МГц, δ , м. д.): 8.61-8.59 (м, 1H), 8.44-8.43 (м, 1H), 8.30 (д, J 2.7 Гц, 1H), 8.26-8.22 (м, 2H), 8.11 (дд, J 8.8, 2.7 Гц, 1H), 7.88 (дд, J 8.5, 1.7 Гц, 1H), 7.72 (дд, J 8.5, 1.7 Гц, 1H), 7.65-7.60 (м, 8H), 7.54-7.48 (м, 4H), 7.47-7.44 (м, 4H), 7.37-7.31 (м, 2H), 7.14 (д, J 8.9 Гц, 1H), 3.92 (с, 3H), 2.72 (с, 3H). 13 C 1 H 1 H 1 ЯМР (CDCl $_3$, 100 МГц, δ , м. д.): 155.7, 146.9, 142.1, 141.4, 141.3, 140.7, 140.3, 137.8, 137.6, 134.0, 132.3, 130.1, 130.0, 129.7, 128.0, 127.7, 127.5, 127.2, 127.2, 126.4, 126.0,

125.6, 123.8, 123.7, 123.5, 123.1, 121.7, 121.6, 120.7, 120.6, 120.3, 120.1, 119.5, 118.2, 111.7, 110.1, 110.1, 109.9, 109.4, 56.2, 31.7. ИК (DRA), см $^{-1}$: 3057, 2955, 2918, 2850, 1714, 1629, 1594, 1499, 1450, 1361, 1325, 1300, 1261, 1231, 1168, 1136, 1096, 1074, 1023, 972, 893, 859, 815, 769, 695, 629, 613, 569, 549, 526. Масс-спектр (ЕІ), m/z: 671 [М] $^+$. Найдено, %: С, 82.29; H, 4.99; N, 10.52. Вычислено для С $_{46}$ Н $_{33}$ N $_5$ O, %: С, 82.24; H, 4.95; N, 10.42.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в рамках данной работы разработан метод синтеза новых Y-структурированных "push-pull" флуорофоров на основе (N2)-1,2,3триазола. Полученные люминофоры поглощают УФ-излучение в области 290—345 нм и излучают в сине-голубом диапазоне в области 350-450 нм. Соединения обладают высокими квантовыми выходами 90-99% вне зависимости от полярности растворителя. На основании данных квантово-химических расчетов было показано, что наличие N-оксидной группы в полученных флуорофорах существенно ухудшает фотофизические свойства, в частности квантовые выходы снижаются практически до ноля. Кроме этого, была проведена оценка возможности использования данных соединений, способных к обнаружению нитроаналитов. Определены константы Штерна—Фольмера, достигающие $1 \times 10^4 \,\mathrm{M}^{-1}$, а также предел обнаружения, который составляет 250— 300 молекул аналита на миллиард (млрд $^{-1}$). Принимая во внимание фотолюминесцентные и хемосенсорные свойства, синтезированные фотоактивные молекулы несомненно представляют интерес для создания материалов для различных областей молекулярной электроники и/или могут рассматриваться в качестве перспективных рабочих элементов сенсорных устройств.

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030", а также в рамках Соглашения с Министерством науки и высшего образования Российской Федерации № 075-15-2022-1118 от 29 июня 2022 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Bureš F. // RSC Adv. 2014. V. 4. № 102. P. 58826–58851. https://doi.org/10.1039/C4RA11264D

- 2. Li K., Ren T.-B., Huan S., Yuan L., Zhang X.-B. // J. Am. Chem. Soc. 2021. V. 143. № 50. P. 21143—21160. https://doi.org/10.1021/jacs.1c10925
- 3. Pucher N., Rosspeintner A., Satzinger V., Schmidt V., Gescheidt G., Stampfl J., Liska R. // Macromolecules. 2009. V. 42. № 17. P. 6519–6528. https://doi.org/10.1021/ma9007785
- Grabowski Z.R., Rotkiewicz K., Rettig W. // Chem. Rev. 2003. V. 103. № 10. P. 3899–4032. https://doi.org/10.1021/cr9407451
- 5. *Escudero D.* // Acc. Chem. Res. 2016. V. 49. № 9. P. 1816–1824. https://doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00299
- Sekar R.B., Periasamy A. // J. Cell Biol. 2003. V. 160.
 № 5. P. 629–633. https://doi.org/10.1083/jcb.200210140
- Shen Q., Wang S., Yang N.-D., Zhang C., Wu Q., Yu C. // J. Lumin. 2020. V. 225. P. 117338. https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2020.117338
- 8. Zheng Q., Juette M.F., Jockusch S., Wasserman M.R., Zhou Z., Altman R.B., Blanchard S.C. // Chem. Soc. Rev. 2014. V. 43. № 4. P. 1044–1056. https://doi.org/10.1039/C3CS60237K
- 9. *Martynov V.I.*, *Pakhomov A.A.* // Russ. Chem. Rev. 2021. V. 90. № 10. P. 1213–1262. https://doi.org/10.1070/RCR4985
- Misra R., Bhattacharyya S.P. Intramolecular Charge Transfer. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2018. https://doi.org/10.1002/9783527801916
- Long Y., Chen H., Wang H., Peng Z., Yang Y., Zhang G., Li N., Liu F., Pei J. // Anal. Chim. Acta. 2012. V. 744. P. 82–91. https://doi.org/10.1016/j.aca.2012.07.028
- 12. *Mauricio F.G.M.*, *Silva J.Y.R.*, *Talhavini M.*, *Júnior S.A.*, *Weber I.T.* // Microchem. J. 2019. V. 150. P. 104037. https://doi.org/10.1016/j.microc.2019.104037
- 13. Tretyakov E.V., Ovcharenko V.I., Terent'ev A.O., Krylov I.B., Magdesieva T.V., Mazhukin D.G., Gritsan N.P. // Russ. Chem. Rev. 2022. V. 91. № 2. RCR5025. https://doi.org/10.1070/RCR5025
- 14. Fu H.-Y., Liu X.-J., Xia M. // RSC Adv. 2017. V. 7. № 80. P. 50720–50728. https://doi.org/10.1039/C7RA10432D
- 15. *Miura Y., Kobayashi K., Yoshioka N. //* New J. Chem. 2021. V. 45. № 2. P. 898–905. https://doi.org/10.1039/D0NJ05323F
- Du F., Li D., Ge S., Xie S., Tang M., Xu Z., Wang E., Wang S., Tang B.Z. // Dye. Pigment. 2021. V. 194. P. 109640. https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109640
- 17. *Fu H.-Y.*, *Xu N.*, *Pan Y.-M.*, *Lu X.-L.*, *Xia M.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2017. V. 19. № 18. P. 11563–11570. https://doi.org/10.1039/C7CP01281K
- Khamrang T., Kathiravan A., Ponraj C., Saravanan D. // J. Mol. Struct. 2021. V. 1238. P. 130442. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130442
- 19. *Chen S.-H.*, *Jiang K.*, *Lin J.-Y.*, *Yang K.*, *Cao X.-Y.*, *Luo X.-Y.*, *Wang Z.-Y.*// J. Mater. Chem. C. 2020. V. 8. № 24. P. 8257–8267. https://doi.org/10.1039/D0TC01870H

- 20. *Lai Q., Liu Q., Zhao K., Shan C., Wojtas L., Zheng Q., Shi X., Song Z.* // Chem. Commun. 2019. V. 55. № 32. P. 4603–4606. https://doi.org/10.1039/C9CC00262F
- 21. Govdi A., Tokareva V., Rumyantsev A.M., Panov M.S., Stellmacher J., Alexiev U., Danilkina N.A., Balova I.A. // Molecules. 2022. V. 27. № 10. P. 3191. https://doi.org/10.3390/molecules27103191
- Wong M.Y., Leung L.M. // Dyes Pigm. 2017. V. 145.
 P. 542–549.
 https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2017.06.054
- 23. *Ahmadi F., Tisseh Z.N., Dabiri M., Bazgir A.* // C. R. Chim. 2013. V. 16. № 12. P. 1086–1090. https://doi.org/10.1016/j.crci.2013.05.006
- 24. *Chen Z., Yan Q., Yi H., Liu Z., Lei A., Zhang Y. //* Chem. Eur. J. 2014. V. 20. № 42. P. 13692–13697. https://doi.org/10.1002/chem.201403515
- Begtrup M., Holm J. // J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1. 1981. P. 503–513. https://doi.org/10.1039/p19810000503
- Beletskaya I.P., Alonso F., Tyurin V. // Coord. Chem. Rev. 2019. V. 385 P. 137–173. https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.01.012
- 27. Chen C., Lu X., Holland M. C., Lv S., Ji X., Liu W., Liu J., Depre D., Westerduin P. // Eur. J. Org. Chem. 2020. V. 2020. № 5. P. 548–551. https://doi.org/10.1002/ejoc.201901519
- 28. Gaussian 16, Revision C.01. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Petersson G.A., Nakatsuji H., Li X., Caricato M., Marenich A.V., Bloino J., Janesko B.G., Gomperts R., Mennucci B., Hratchian H.P., Ortiz J.V., Izmaylov A.F., Sonnenberg J.L., Williams-Young D., Ding F., Lipparini F., Egidi F., Goings J., Peng B., Petrone A., Henderson T., Ranasinghe D., Zakrzewski V.G., Gao J., Rega N., Zheng G., Liang W., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Throssell K., Montgomery J.A. Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M.J., Heyd J.J., Brothers E.N., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T.A., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A.P., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Millam J.M., Klene M., Adamo C., Cammi R., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Farkas O., Foresman J.B. Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
- Weigend F., Ahlrichs R. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2005. V.7. P. 3297–3305.
- Weigend F. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2006. V. 8. P. 1057–1065. https://doi.org/10.1039/B515623H
- Grimme S., Ehrlich S., Goerigk L. // Theor. J. Comput. Chem. 2011. V. 32. P. 1456–1465. https://doi.org/10.1002/jcc.21759

- 32. *Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H.* // J. Chem. Phys. 2010. V. 132. P. 154104. https://doi.org/10.1063/1.3382344
- 33. libint2 library // Доступно по ссылке: http://lib-int.valeyev.net/ (ссылка активна на 09.01.2023)
- 34. Libxc library // Доступно по ссылке: https://tddft.org/programs/libxc/ (ссылка активна на 09.01.2023).
- 35. *Lakowicz J.R.* Principles of Fluorescence Spectroscopy, Third Edition. Springer New York, 2017. https://doi.org/10.1007/978-0-387-46312-4
- 36. Campbell K., Zappas A., Bunz U., Thio Y.S., Bucknall D.G. // J. Photochem. Photobiol. A Chem. 2012. V. 249. P. 41–46. https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2012.08.015

Y-SHAPED FLUOROPHORES BASED ON N(2)-ARYL-1,2,3-TRIAZOLES: SYNTHESIS, THEORETICAL CALCULATIONS, OPTICAL PROPERTIES, AND APPLICATION OPPORTUNITIES FOR DETECTION OF NITROAROMATICS

I. A. Lavrinchenko^a, T. D. Moseev^a, M. V. Varaksin^{a,b,#}, Y. A. Seleznev^a, L. K. Sadieva^a, G. V. Zyryanov^{a,b}, A. N. Tsmokaluk^a, Academician of the RAS V. N. Charushin^{a,b}, and Academician of the RAS O. N. Chupakhin^{a,b,##}

^aUral Federal University, 620002 Yekaterinburg, Russian Federation

^bInstitute of Organic Synthesis, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620990 Yekaterinburg, Russian Federation [#]E-mail: m.v.varaksin@urfu.ru

##E-mail: chupakhin@ios.uran.ru

A five-stage method for the synthesis of Y-shaped push-pull fluorophores based on 2-(4'-methoxyphenyl)-1,2,3-triazole has been described. These molecules proved to possess emission in the range from 350 to 450 nm and high quantum yields QY 90–99% in solvents of various polarity. An opportunity of using the obtained compounds as chemosensors for both aromatic and aliphatic nitroanalytes at concentrations from 300 ppb has been elucidated.

Keywords: fluorophores, triazoles, chemosensors, nitroaromatic compounds