

# КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ДИФЛАВОНОЛОВ С ИОНАМИ $Mg^{2+}$ : УСТОЙЧИВОСТЬ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

*Мороз В.В.,<sup>1</sup> Рошаль О.Д.,<sup>1</sup> Пивоваренко В.Г.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> НИИ химии при Харьковском национальном университете им. В.Н. Каразина  
rochal@vk.kharkov.ua

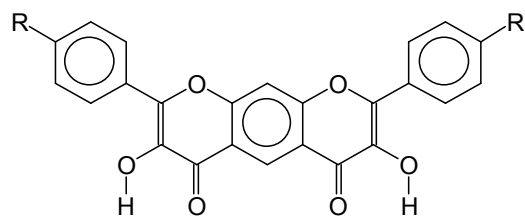
<sup>2</sup> Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко  
pvg@mail.univ.kiev.ua

Дифлавонолы имеют молекулы симметричного строения, с двумя центрами комплексообразования - орто-оксикарбонильными группировками, включающими гидроксильные группы низкой кислотности. В возбужденном состоянии в молекулах дифлавонолов наблюдается сразу несколько взаимосвязанных электронных и структурных эффектов:

- асимметризация электронной структуры и, как следствие, изменение топологии молекулы и значительный рост кислотности одной из гидроксигрупп;
- межфрагментный перенос заряда (ICT) между одним из боковых фенильных циклов и бензодипириновым фрагментом;
- внутримолекулярный перенос протона (ESIPT) при участии более кислой из двух гидроксигрупп.

Комплексообразование изменяет структуру дифлавонолов и оказывает значительное влияние на процессы, происходящие в молекулах в возбужденном состоянии. В докладе приведены результаты исследования комплексов с ионами  $Mg^{2+}$ . В качестве лиганда были использованы незамещенный дифлавонол, а также его бис-(4'-диметиламино)-производное (см схему).

Обнаружено, что комплексообразование носит ступенчатый характер, и приводит к последовательному образованию комплексов  $MgL$  и  $Mg_2L$  типов.



*I* - R = H; *II* - R = N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

Представлены константы устойчивости и спектрально-флуоресцентных свойствах образующихся комплексов. Приведены данные теоретических расчетов электронной структуры, энтальпий образования комплексов, стандартных энергий Гиббса комплексообразования.

Сделаны выводы о строении комплексов дифлавонолов: присоединение первого иона сопровождается замещением атома водорода одной из гидроксильных групп и приводит к образованию хелата. Второй комплекс, судя по расчетам стандартных энергий Гиббса, имеет нециклическое строение.

Анализ полученных данных показывает, что комплексообразование дифлавонолов приводит к подавлению внутримолекулярного переноса протона свободной гидроксигруппы в  $S_1$ -состоянии, а также, в зависимости от концентрации иона металла в растворе, к изменению интенсивности и направленности межфрагментного переноса заряда при возбуждении.