



ナフトジチオフエンジオンを基盤とする有機色素の合成、固体構造及び光吸収特性

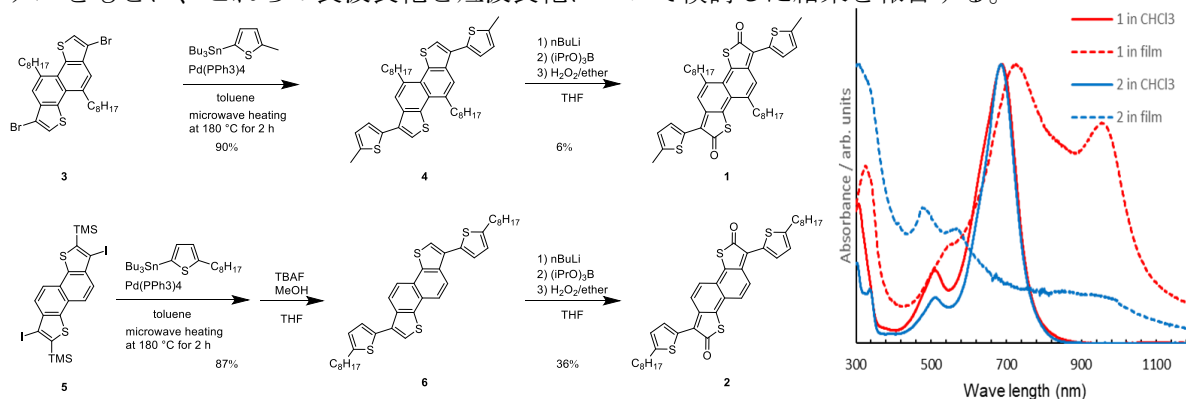
Synthesis, solid-state structures, and optical properties of organic dyes based on a naphthodithiophenedione

眞下 清仁、川畑 公輔、瀧宮 和男（東北大院理）

【緒言】有機近赤外色素は、光学フィルターやバイオイメージングへの応用が注目されており、さらに、半導体特性を付与することで、効率的な太陽電池やセンシングといった光電変換素子への応用も期待される。一般に有機色素分子の吸収の長波長化には、分子の HOMO と LUMO のエネルギーギャップを狭める手法が用いられる。一方で、分子の光吸収特性は溶液中（一分子）と固体中では異なる場合が多く、Kasha の二量体モデルによると、固体中の吸収波長は、発色団の中心間距離および遷移双極子モーメントがなす角度により変わることが知られている。[1] このため、固体中の分子配列制御も吸収の長波長化のための重要なアプローチの一つである。

本研究では、当研究室で最近報告したナフトジチオフエンジオンを基盤とする近赤外吸収有機半導体骨格の短軸方向と長軸方向のそれぞれにオクチル基を導入した化合物 **1** と **2** を合成し、その分子構造と固体状態での構造および光吸収特性との相関を調査した。[2]

【結果・考察】**3** および **5** を出発原料として、右田-小杉-Stille カップリングと中央ナフトジチオフエン骨格のキノイド化により目的化合物 **1** および **2** を合成した (Scheme 1)。目的化合物 **1** および **2** では、溶液中において最大吸収波長がそれぞれ 689 nm と 686.5 nm であり、吸収スペクトルもおおよそ一致した。しかし、薄膜では **1** の最大吸収波長が大幅に長波長化しているのに対し、**2** では大きく短波長化していることが観測された (Figure 1)。本発表では、結晶構造と Kasha の二量体モデルをもとに、これらの長波長化と短波長化について検討した結果を報告する。



Scheme 1 化合物 **1** および **2** の合成

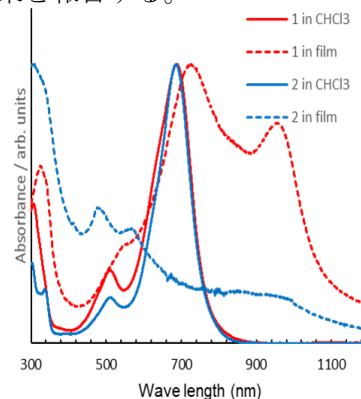


Figure 1 **1** および **2** の紫外可視・近赤外吸収スペクトル

<参考文献>

- 1) *Pure and Applied Chemistry*. **1965**, *11*, 371 – 392.
- 2) *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 4579 – 4589.

発表者紹介

氏名 眞下 清仁 (ましも きよひと)
 所属 東北大学 大学院理学研究科 化学専攻
 学年 修士1年
 研究室 有機化学第二研究室

