

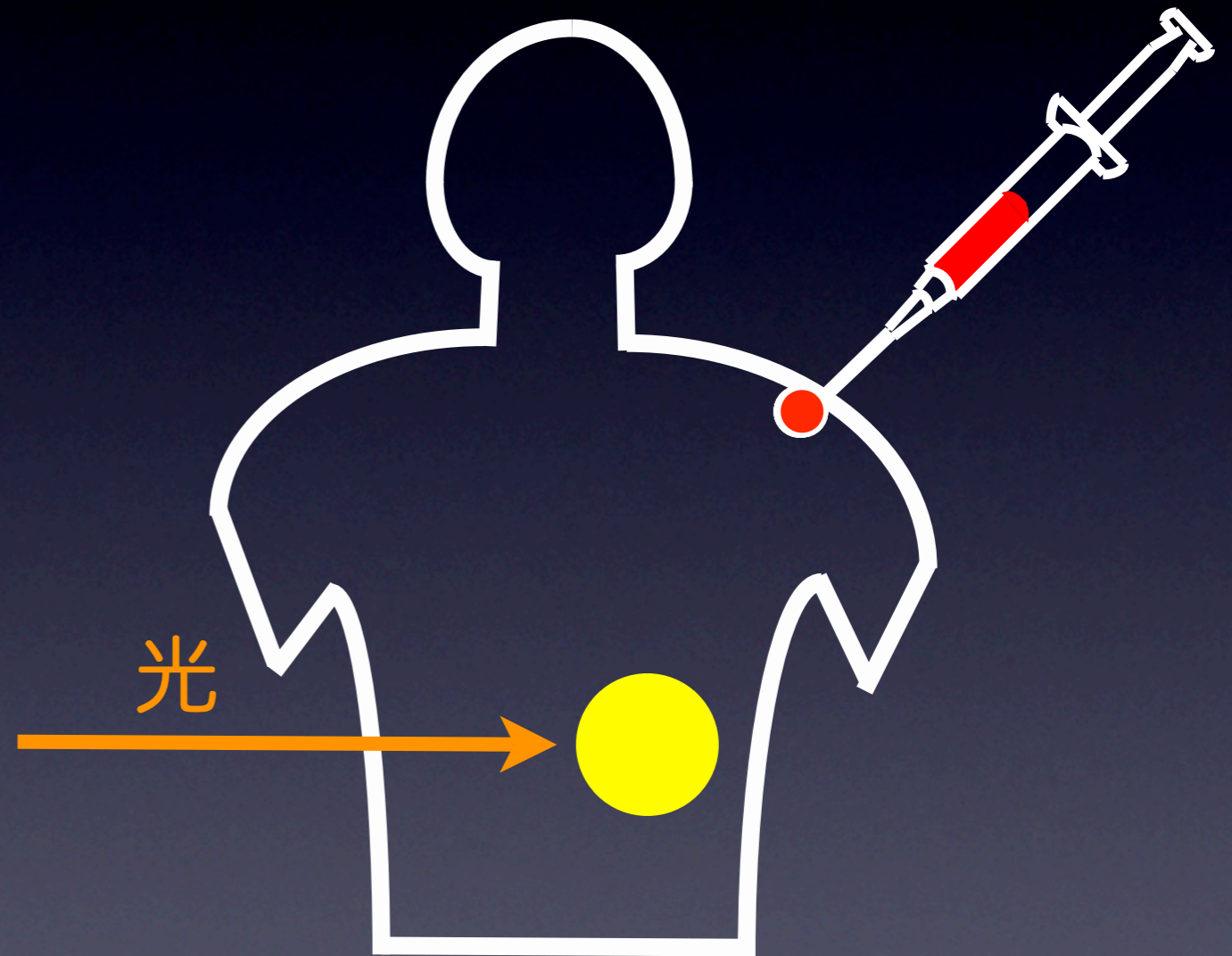
合成化学・分光学・計算化学的アプローチによる  
新規機能性近赤外色素の開発と物性評価

清水 宗治・福田 貴光・村中 厚哉・中 寛史・中井 克典・松本 洋太郎

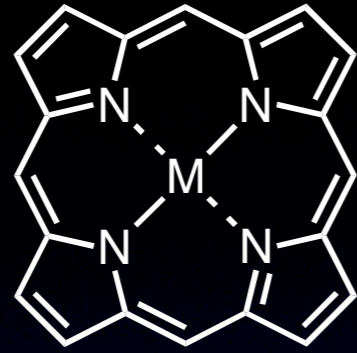
# 近赤外色素に期待される応用可能性

## 癌の光線力学療法

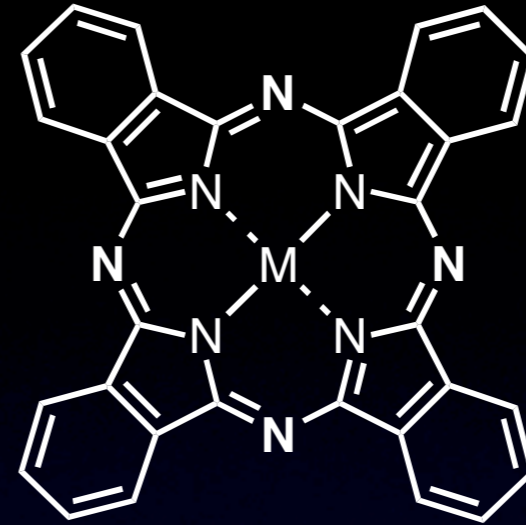
- ・ 腫瘍組織への集積性
- ・ 組織透過性の高い波長領域での吸収特性



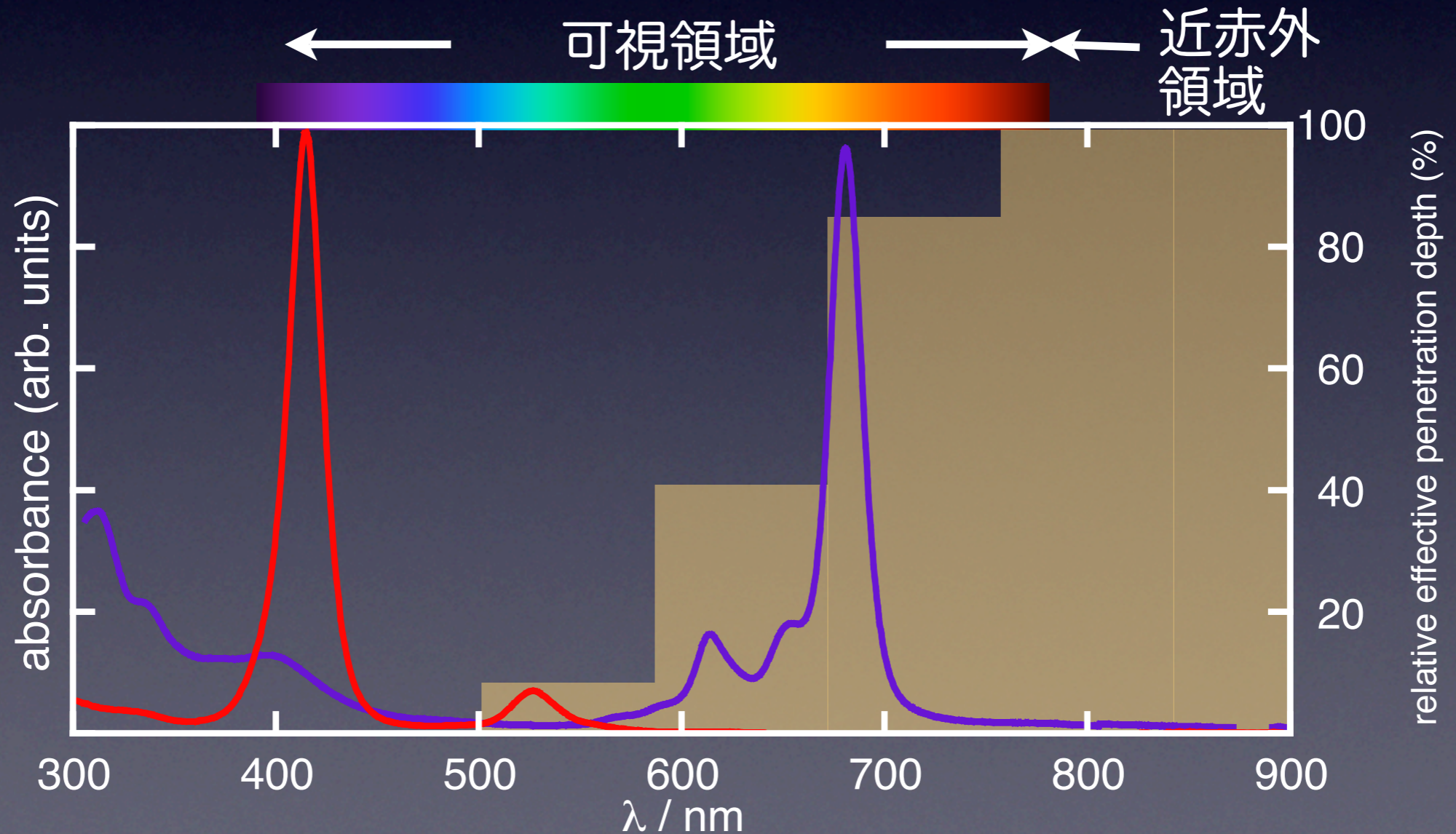
# 光線力学療法を指向した新規光増感剤の創製



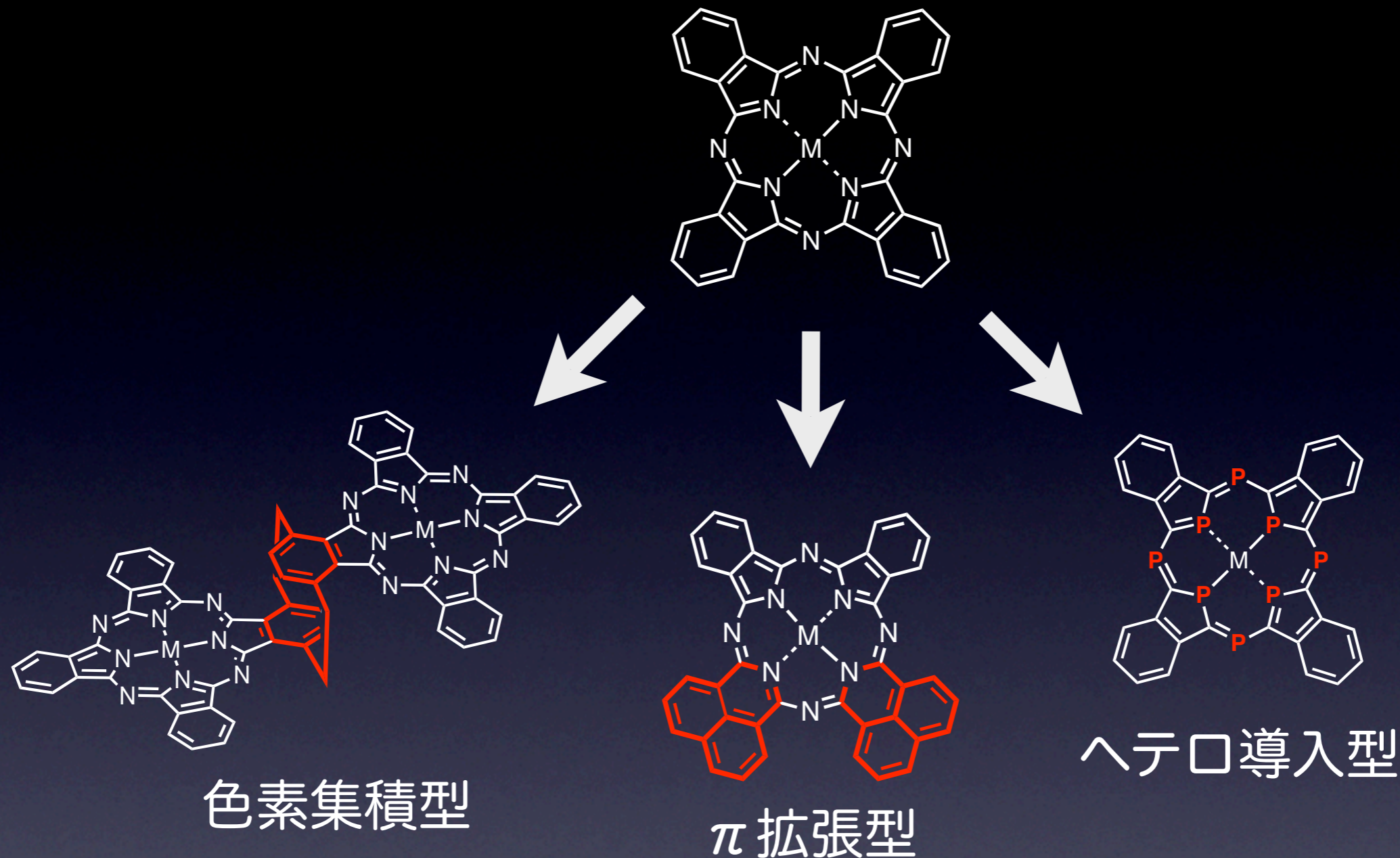
ポルフィリン



フタロシアニン

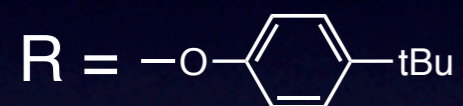
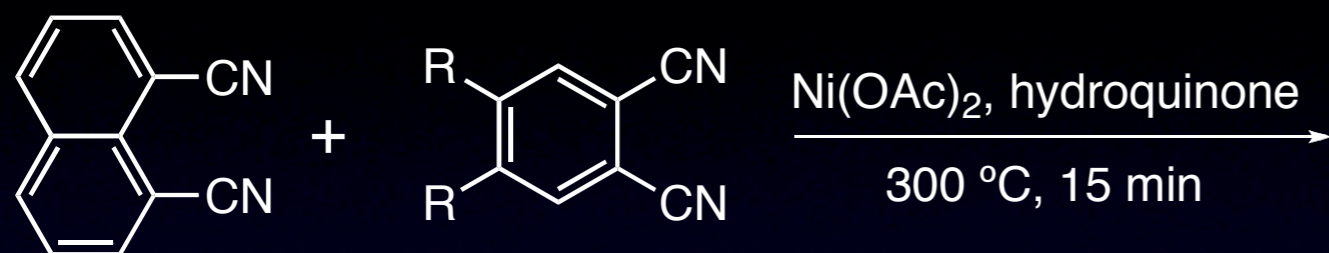


# フタロシアニンを用いた近赤外色素の合成戦略



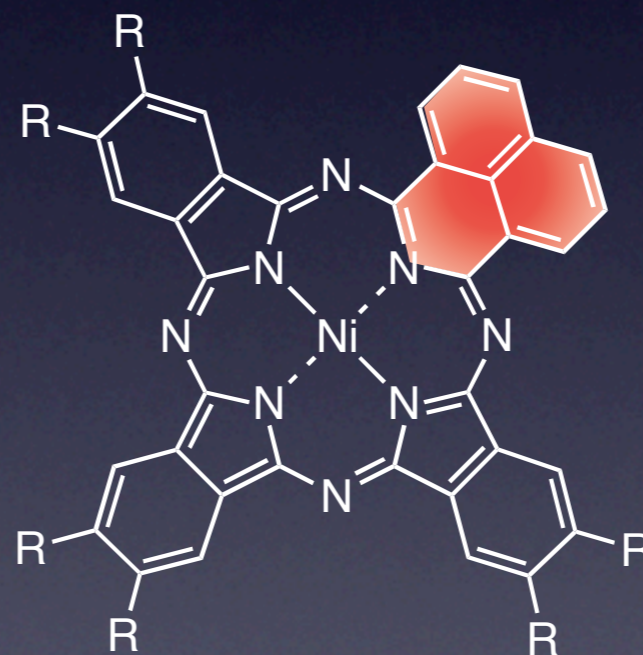
- ・ 有機合成による色素の合成
- ・ 分光学的・計算化学的アプローチによる吸収特性の解明

# $\pi$ 拡張型フタロシアニン



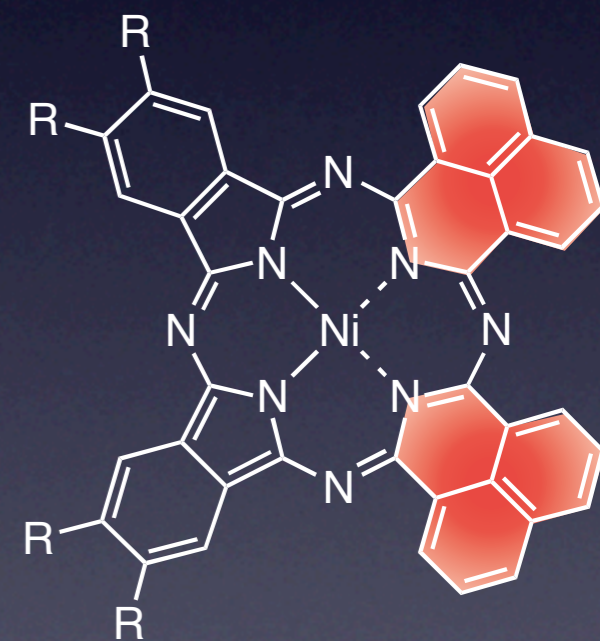
9.1%

+



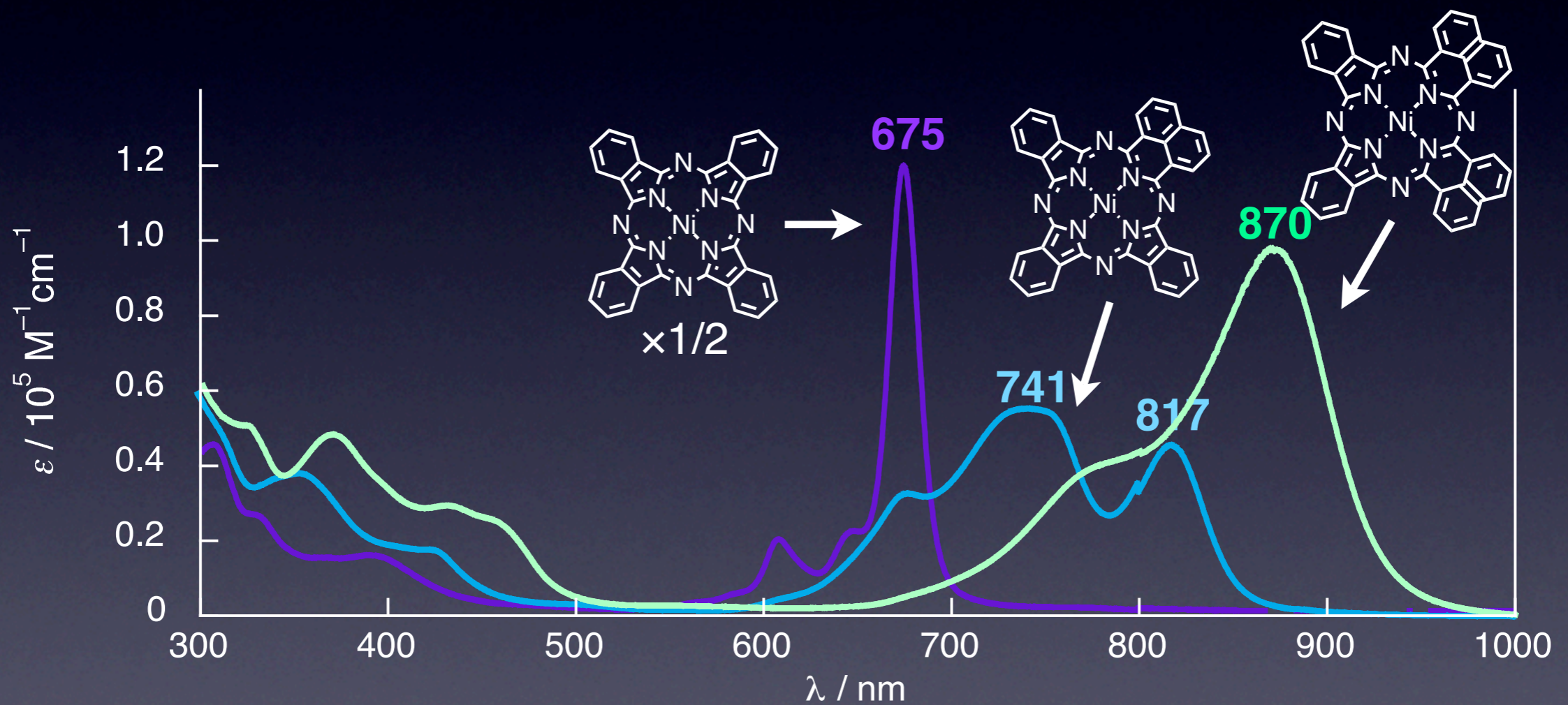
26.4%

+

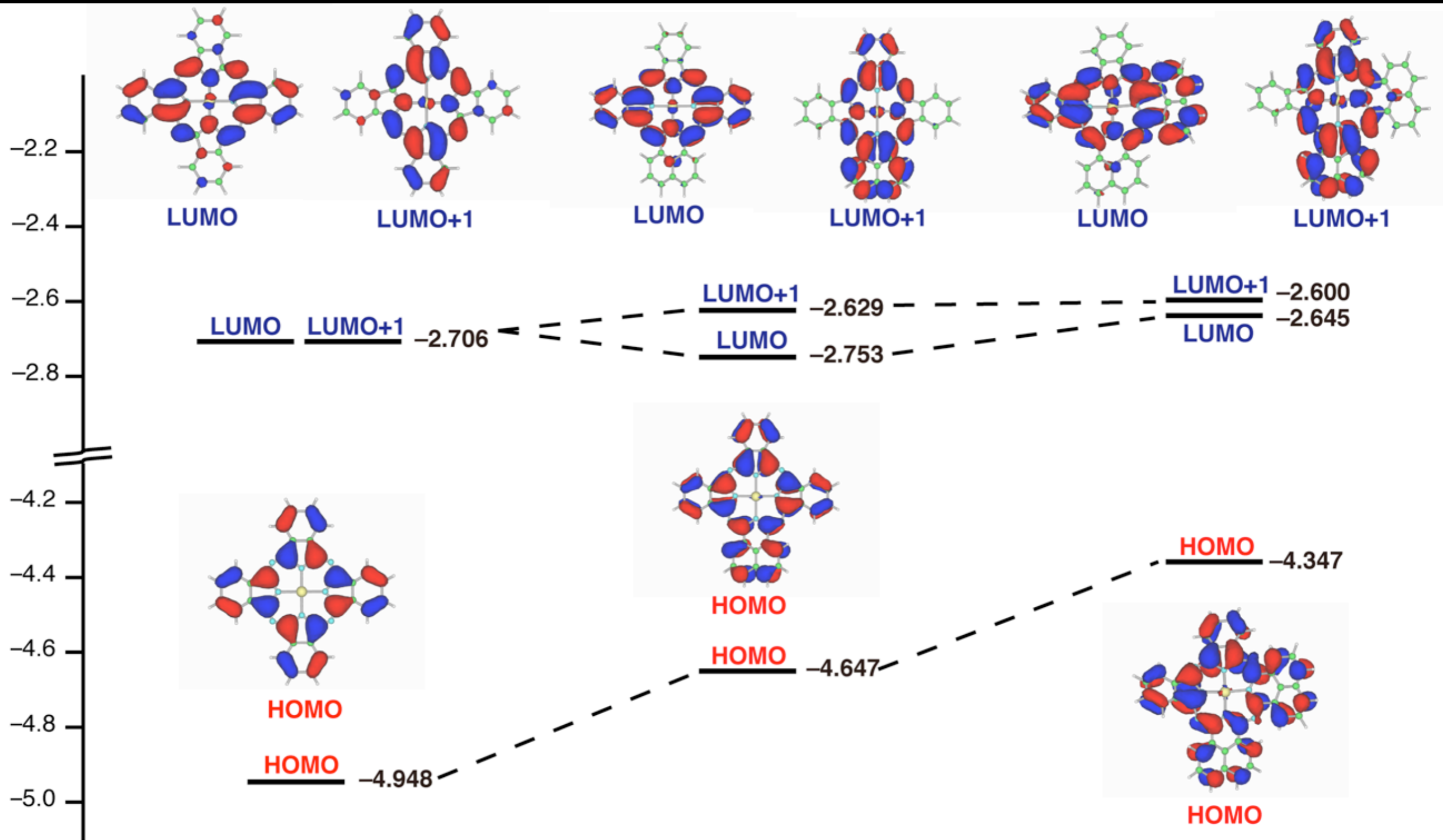


13.1%

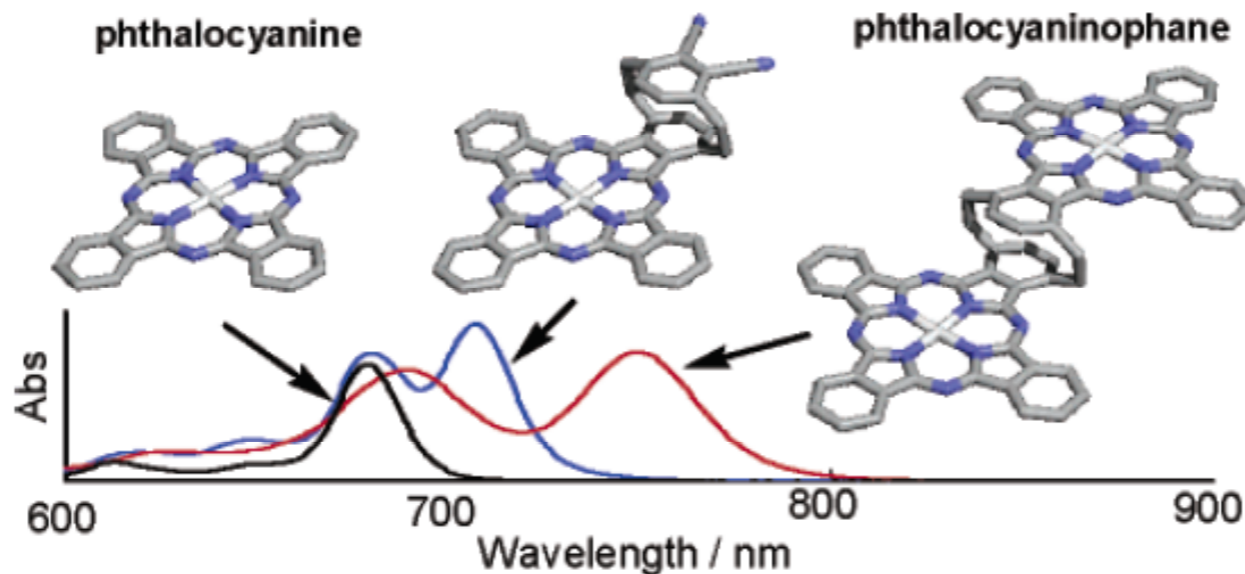
# $\pi$ 拡張型フタロシアニン



# $\pi$ 拡張型フタロシアニン

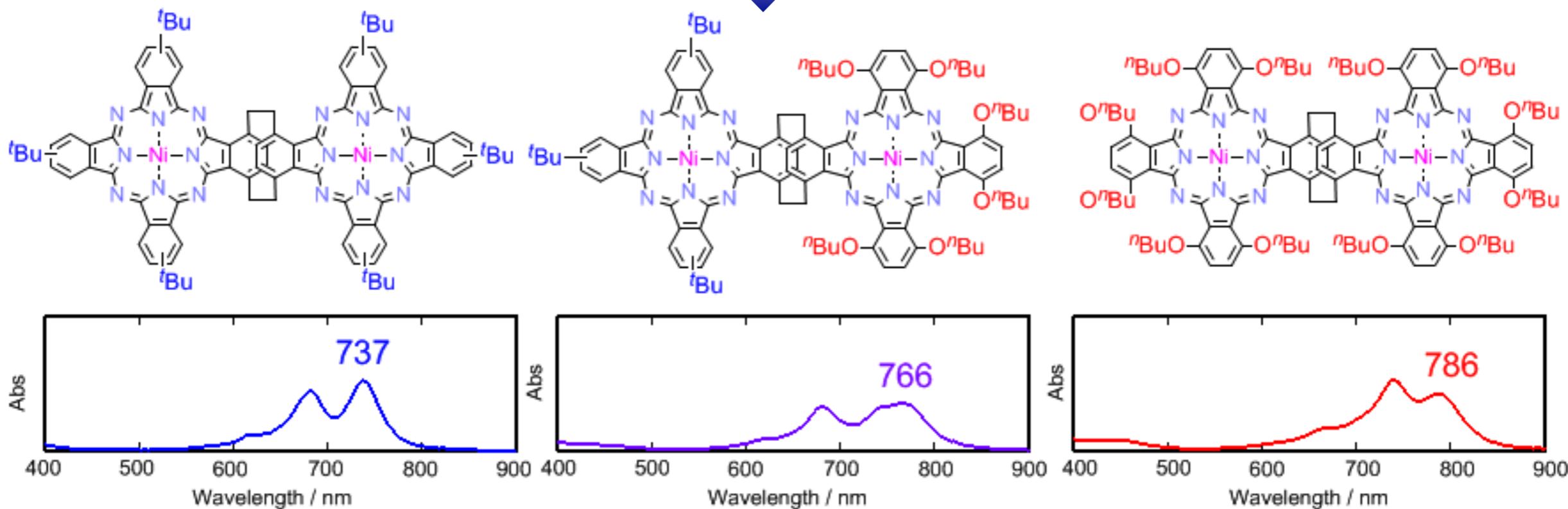


# 色素集積型フタロシアニン



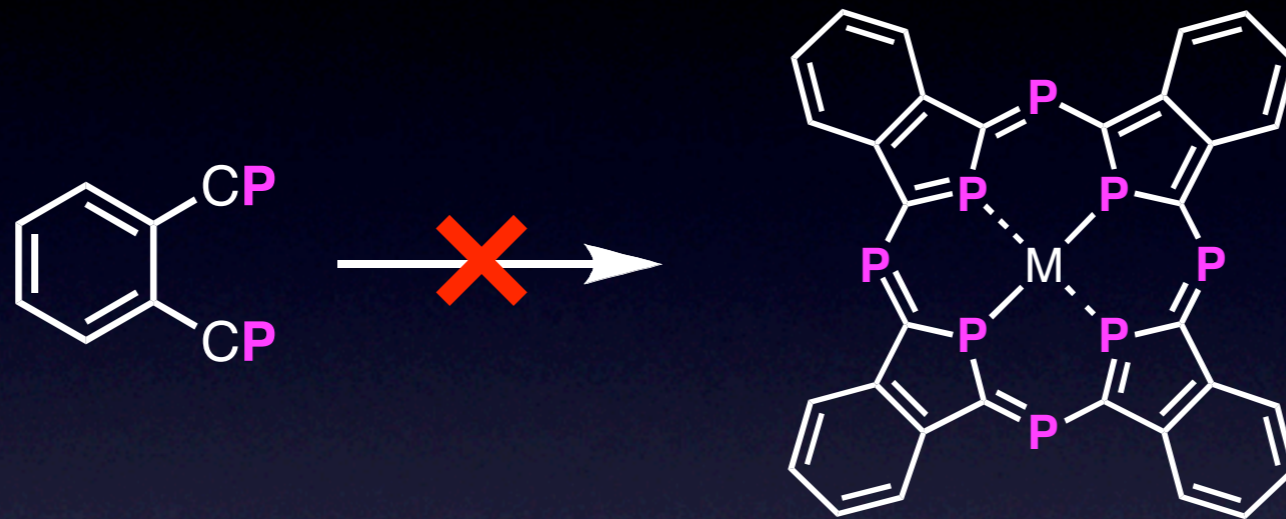
*J. Am. Chem. Soc.*, **129**, 4516 (2007)

(Highlights in *Chemistry and Industry*, **8**, 26 (2007)).

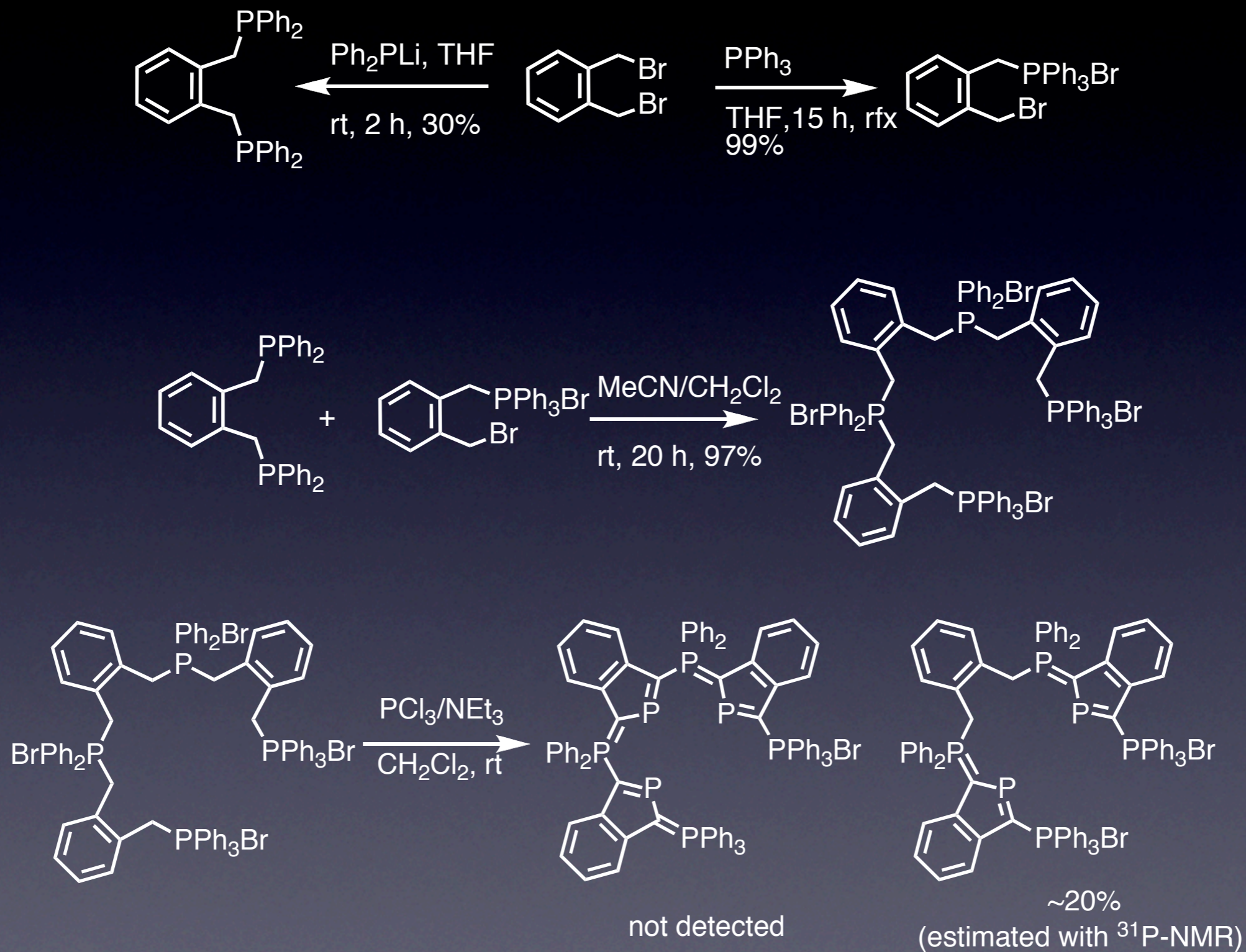




# ヘテロ導入型フタロシアン



# ヘテロ導入型フタロシアン



# まとめ

- ・フタロシアニン骨格を利用した近赤外色素精製を目指して色素集積型、 $\pi$ 拡張型、ヘテロ導入型の3つのアプローチを提示し、前者二つについては目的の近赤外領域に吸収を示す分子の構築に成功した。
- ・1,8-ジシアノナフタレンを反応させることでアザフェナレンユニットが複数個導入された分子の合成に成功し、また理論計算、分光学的手法により物性の解明を行った。
- ・シクロファンユニットを用いてフタロシアニンを連結させることで、共役の拡張による吸収の長波長化が観測された。また電子供与性の置換基を導入することでさらに吸収が長波長化することが分かった。
- ・リンの反応性を巧みに利用し、段階的に合成することでオリゴイソインドールユニットの窒素原子をリンに置き換えることに成功した。