キノイド構造を有するフェノチアジン誘導体の励起状態ダイナミクス

（立命館大生命科学[1]・JST さきがけ[2]）○落合 奎介[1]・福永 壱成[1]・岡安 祥徳[1]・永井 邑樹[1]・小林 洋一[1,2]

Excited-State Dynamics of a Phenothiazine Derivative Having a Quinoidal Structure ([1]*College of Life Sciences, Ritsumeikan University,* [2]*PRESTO JST* ○Keisuke Ochiai,[1] Issei Fukunaga,[1] Yoshinori Okayasu,[1] Yuki Nagai,[1] Yoichi Kobayashi[1,2]

Quinoidal compounds absorb long-wavelength light in spite of their simple structures, so they seem promising for dye-sensitized solar cells and photodiodes. However, the excited-state lifetime of quinoidal compounds is very short, due to very fast nonradiative relaxations. In this study, we synthesized a quinoidal phenothiazine derivative **1** (Fig. 1a) and evaluated the excited-state dynamics of **1** by femtosecond transient absorption spectroscopy.
Keywords : Quinoid; Phenothiazine; Conical Intersection; Transient Absorption; Potential Energy Surface;

キノイド構造は高い平面性を有し効率的にπ共役を拡張することができるため、小さい分子骨格にもかかわらず長波長の光を吸収する。そのため色素増感太陽電池やフォトダイオードなどへの応用が期待される。一方、キノイド化合物は光吸収によって得たエネルギーの多くを熱エネルギーとして失活してしまい、その励起状態寿命は極めて短い。無輻射失活を抑制し数十ピコ秒で緩和してしまう過程を長寿命化できれば、励起状態を高い効率で利用できる。

そこで本研究では、キノイドの励起状態ダイナミクスを解析する目的で、キノイド構造を有するフェノチアジン誘導体 **1**（Fig. 1a）を合成し、**1** の励起状態ダイナミクスをフェムト秒過渡吸収分光測定により詳細に解析した。

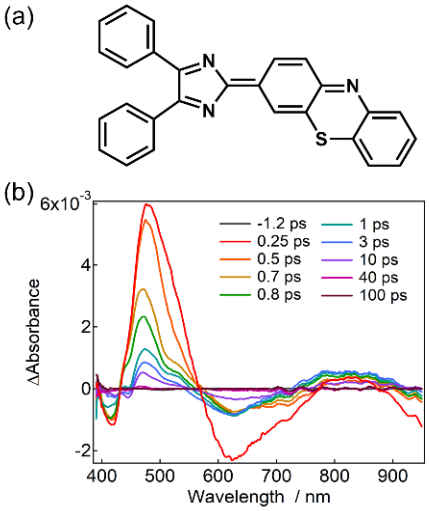

Fig. 1 (a) Molecular structure of **1** and (b) the transient absorption spectra of **1** in acetonitrile excited with a 650 nm femtosecond laser pulse (20 nJ/pulse).

1 を 650 nm のパルス光で励起すると、S_1 の生成に伴って直ちに 420 nm と 650 nm に基底状態のブリーチ、480 nm に励起状態由来の吸収、950 nm に誘導放出が観測された（Fig. 1b）。その後、830 nm 付近にブロードな吸収を持つ過渡種が生成し、時定数 10 ps で基底状態に緩和したことから、**1** は励起状態の緩和過程において構造変化を経由することがわかった。励起状態における分子振動やエネルギー準位関係の詳細は発表で述べる。

© The Chemical Society of Japan