

## トリフェニルアミンを導入したナノグラフェンの合成と近赤外調光性能

(広大院先進理工<sup>1</sup>・積水化学工業株式会社<sup>2</sup>) ○松本 育也<sup>1</sup>・関谷 亮<sup>1</sup>・中壽賀 章<sup>2</sup>・福井 弘司<sup>2</sup>・孫 仁徳<sup>2</sup>・灰野 岳晴<sup>1</sup>

The synthesis and NIR electrochromic properties of nanographene possessing triphenylamine (<sup>1</sup>Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University, <sup>2</sup>Sekisui Chemical Co., Ltd.) ○Ikuya Matsumoto,<sup>1</sup> Ryo Sekiya,<sup>1</sup> Akira Nakasuga,<sup>2</sup> Hiroshi Fukui<sup>2</sup> Ren-De Sun,<sup>2</sup> Takeharu Haino,<sup>1</sup>

In this presentation, we will report the NIR electrochromic behavior of NG-2 with triphenylamine unit. Graphene mixtures were prepared by the oxidative cutting of graphite, which were separated by dialysis membrane (2 kDa and 15 kDa) to give rise to nanographene NG-1. Triphenylamine derivative was introduced to NG-1 to yield NG-2 (Fig. 1a). The UV-Vis-NIR absorption of NG-2 in acetonitrile-chlorobenzene was increased by increasing the apply voltages (Fig.1b). At an applied voltage of 1.1 V, the transmittance of the visible-NIR light was reduce by approximately 60%. The TD-DFT calculation for the oxidated state of the model structure of NG-2 indicated that the electron promotion from HOMO-3 on the basal plane to SOMO on the TPA unit occurred upon shining a light of 1450 nm.

**Keywords :** Nanographene; Electrochromism; Oxidative cutting; NIR-absorption; Redox reaction

本発表では、トリフェニルアミンを導入したナノグラフェンが近赤外領域に可逆的な調光性能を示す挙動を見出したので報告する<sup>1)</sup>。

黒鉛粉末の酸化分解により得られた NG-1 の外周部分のカルボキシ基の化学修飾はトリフェニルアミンを有する NG-2 を与えた。NG-2 は <sup>1</sup>H NMR・IR スペクトルにより同定された。溶液中の NG-2 の調光性能について検討した。NG-2 のアセトニトリル-クロロベンゼン混合溶液中の吸光度は電圧の印加に伴って増大した。電圧を印加したときの NG-2 の溶液の透過率は可視光領域で最大 60%、近赤外領域で最大 65% 変化した。NG-2 のモデル構造の一電子酸化状態の TD-DFT 計算は 1450 nm に強い振動子強度を持つ遷移を示唆した。これは HOMO-3 であるナノグラフェンの  $\pi$  平面から SOMO であるトリフェニルアミンへの電子遷移であることを示唆している。

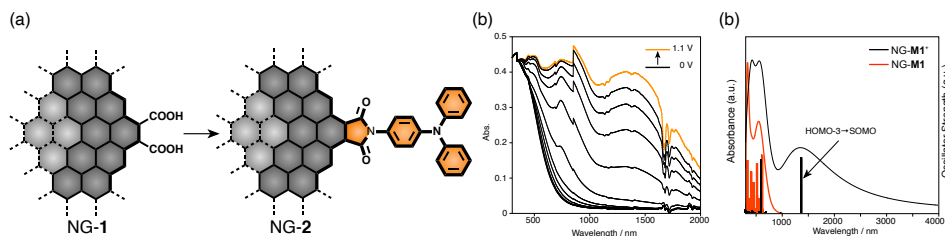


Figure 1. (a) The preperation of NG-2. (b) The spectroelectrochemistry of NG-2. (c) TD-DFT calculation of NG-M1 The structures were optimized by the Gaussian16 Rev. B. program using B3LYP/6-31G(d,p) and UB3LYP/6-31G(d,p) level of theories.

1) **Matsumoto, I.; Sekiya, R.; Nakasuga, A.; Fukui, H Ren-De Sun, Haino, T., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022.** (Just submittance)