

ヒドロキシアントラキノン金属錯体色素の色と分子構造について

(横浜国大院環情) ○長谷川 璃乃・金聖勲・松本 真哉

Color and molecular structure of hydroxyanthraquinone metal complex dyes (Yokohama National University Graduate School of Environment and Information Science) ○Rino Hasegawa, Sunghoon Kim, Shinya Matsumoto

Anthraquinones are known to produce a wide range of colors by introducing substituents, and hydroxyanthraquinones have particularly been used since ancient times to dye fabrics using metals as mordants. Previous research has focused on the synthesis of anthraquinone metal complexes and the relationship between structures, but the color and molecular structure have not been studied thoroughly. Therefore, we synthesized metal complexes of 1-hydroxyanthraquinone(1-OHAQ) and 1,2-hydroxyanthraquinone(1,2-diOHAQ) and investigated the correlation between their absorption spectra and molecular structures. The synthesis scheme is shown in Figure 1. The absorption maximum of these compounds was bathochromically shifted by the metal complexation. In this study, this was supported by molecular orbital calculations. The change in the absorption maximum depending on the central metal (Fig. 2) was also investigated. It was found that the larger the electro negativity of the metal used in the complexation, the shorter the bond length between the oxygen and the metal, and the shorter the wavelength of the absorption maximum.

Keywords : Anthraquinone dyes ; Organometallic complex dyes ; Absorption spectrum ; Electron negativity ; Molecular orbital calculation

アントラキノンは置換基を導入することで幅広い色を出すことで知られており、なかでもヒドロキシアントラキノンは、古代から金属を媒染材として布を染色するのに用いられていた。先行研究では、アントラキノン金属錯体の合成と構造の関係を中心に行われてきたが、色や分子構造については深く研究されていなかった。そこで私たちは、1-ヒドロキシアントラキノン(1-OHAQ)及び 1,2-ヒドロキシアントラキノン(1,2-diOHAQ)について、金属錯体を合成し、その吸収スペクトルと分子構造の関係を調べた。合成スキームを図1に示す。これらの吸収極大は、金属錯体化することで長波長化した。本研究では、これを分子軌道計算により、中心金属の種類による吸収極大の変化(図2)と併せて検討した。計算の結果、錯体に用いた金属の電気陰性度が大きくなるほど、酸素-金属間の結合長が短くなり、極大吸収波長は短波長側にシフトすることがわかった。

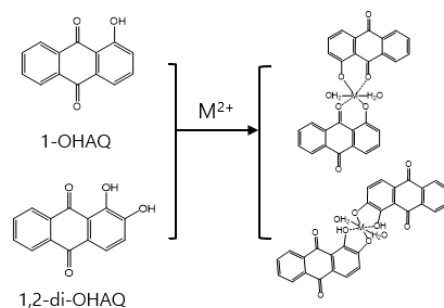


Fig. 1 The synthesis scheme of hydroxyanthraquinone metal complexes

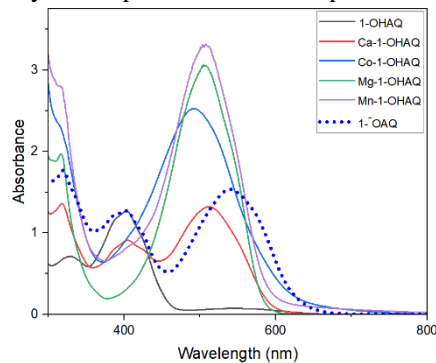


Fig. 2 Wavelengths of 1-OHAQ and its metal complex