

N-(インドール-2-イルメチリデン)-4-メトキシアニリンのアセトン共存下における光学特性

(大阪教育大) ○薮内 智史・辻 雄伍・西 正人・種田 将嗣

Optical properties of *N*-(1*H*-indol-2-ylmethylidene)-4-methoxyaniline in the presence of acetone (*Department of Science Education, Faculty of Education, Osaka Kyoiku University*)

○Satoshi Yabuuchi, Yugo Tsuji, Masato Noshi, Masatsugu Taneda

Indole and its derivatives, are useful compounds to derive pharmaceutical and biological materials can function as a hydrogen donor of hydrogen bond because of its high acidity of a hydrogen atom at 1 position. Introduction of imine group on 2 position of an indole ring form five membered intramolecular hydrogen bond; the Schiff base, *N*-(1*H*-indol-2-ylmethylidene)aniline (**InP**) can undergo excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) from the indole ring to the nitrogen atom of the imine group. And *trans-cis* isomerization of C=N double bond can be occurred by light irradiation. In this study, optical properties of *N*-(1*H*-indol-2-ylmethylidene)-4-methoxyaniline (**InOM**) in solution were investigated.

In hexane solution, **InOM** showed no color change upon exposure with UV light. Addition of acetone to the solution induce photosensitivity of **InOM** and a spectrum of the solution was changed by UV irradiation. TD-DFT simulation of **InOM** suggests that the color-changed species would be *cis*-isomer.

Keywords : *photoisomerization; Schiff base; energy transfer; heteroaromatic compounds; intramolecular hydrogen bond*

Acknowledgement

This work was performed under the Cooperative Research Program of "Network Joint Research Center for Materials and Devices". The computations were performed using Research Center for Computational Science, Okazaki, Japan.

インドール類は N-H の水素原子の酸性度が高いことから、水素ドナーとして機能して水素結合を形成することができる。インドールの 2 位にイミノ基を導入した Schiff 塩基である *N*-(インドール-2-イルメチリデン)アニリン (**InP**) は、五員環型分子内水素結合を形成することが可能な分子骨格を持つことから、光励起による励起状態分子内水素移動 (ESIPT) を起こすことが期待できる。また、分子中の C=N 結合による *trans-cis* 異性化反応を起こす可能性もある。本研究では **InP** のアニリン芳香環の 4 位にメトキシ基を導入した化合物(**InOM**)の溶液中における光応答性を報告する。

InOM はヘキサンのような無極性溶媒中では紫外線を照射しても変化を示さないが、アセトン-ヘキサン混合溶媒中では紫外光照射による吸収スペクトルの変化が観測された。TD-DFT 計算により光異性化後の化学種は C=N 結合に由来した *trans* 体から *cis* 体に異性化したものであることが示唆された。

[謝辞]

この研究は「物質・デバイス領域共同研究拠点」の共同研究プログラムの助成を受けたものです。量子化学計算は計算科学研究センターを利用して行いました。