

二重 N-混乱ヘキサフィリン金属(II)錯体を基体とする第三近赤外光応答色素の合成と物性

(都立大院理¹) ○西口 友里葉¹・杉浦 健一¹・石田 真敏¹

Synthesis and properties of near-infrared III light-responsive dyes based on a double N-confused hexaphyrin bis-metal(II) complex (¹*Graduate School of Science, Tokyo Metropolitan University*) ○Yuriha Nishiguchi,¹ Ken-ichi Sugiura,¹ Masatoshi Ishida¹

Small molecular dyes that absorb and emit light in the third near-infrared region, specifically at wavelengths above 1500 nm, have attracted attention for their potential applications in next-generation bioimaging and therapies. In this study, we designed and synthesized large π -conjugated metal complexes based on doubly N-confused hexaphyrin analogs containing two metal ions within the cavities. The resulting bis-Pd hexaphyrin complex exhibited intense absorption in the NIR-III region and narrow HOMO-LUMO energy gaps.

Keywords : Near Infrared Light; Palladium; Expanded Porphyrin; Emission

波長 1500 nm 以上の生体透過性の高い第三近赤外線領域の光を吸収・発光する色素分子は次世代生体イメージング応用に向けて注目を集めている。我々は、「ヘキサフィリン」と呼ばれる拡張ポルフィリン分子を基盤として、独自の骨格修飾法“N-混乱法”を使うことで、様々な金属錯形成による特異なd/ π 共役構造を有する誘導体の合成を報告している。その一例として、二核パラジウム(II)錯体(**t-Pd₂-2**)においては、異常に深色シフトした NIR-II 吸収帯($\lambda_{\text{max}} = 1466 \text{ nm}$)を示し、光音響イメージングにおける造影剤として機能することを見出している (Figure 1)。^[1]

本研究では一般にポルフィリン系分子で観測される遷移禁制の Q 帯吸収帯の増強を目指して、分子長軸に沿ってエチニル置換基を連結した二重 N-混乱ヘキサフィリン類縁体(**t-Pd₂-4**)を合成した。分光解析において、第三近赤外線領域において大きな吸収帯を示すとともに発光を示すことを明らかにした。

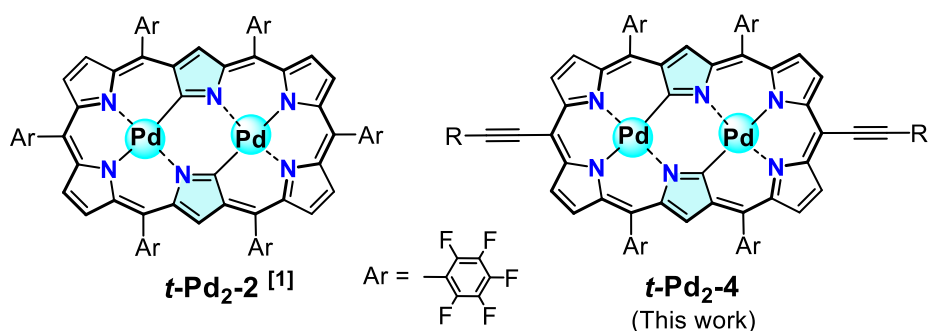


Figure 1. Chemical structures of hexaphyrin-based dyes used in this work

[1] M. Ishida, D. Kim, H. Furuta *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 16161.