

重回帰分析を用いた BODIPY の置換基効果に関する理論研究

(¹ 阪大院基礎工, ² 阪大 QIQB, ³ 阪大 RCSEC, ⁴ 阪大 ICS-OTRI, ⁵ 阪大 OTRI-Spin) 柴田 果歩¹・多田 幸平¹・岸 亮平^{1,2,3,4}・北河 康隆^{1,2,3,4,5}

Theoretical study on substituent effects of BODIPY derivatives using multiple regression analysis. (¹ Grad. Sch. Eng. Sci., Univ. of Osaka, ² QIQB, Univ. of Osaka, ³ RCSEC, Univ. of Osaka, ⁴ ICS-OTRI, Univ. of Osaka, ⁵ OTRI-Spin, Univ. of Osaka) ○Kaho Shibata¹, Kohei Tada¹, Ryohei Kishi^{1,2,3,4}, Yasutaka Kitagawa^{1,2,3,4,5}

BODIPY derivatives are widely utilized in applications such as dye lasers and biofluorescent probes because of their high fluorescence quantum yields and stable emission properties independent of pH or solvent polarity. Furthermore, increasing attention has been paid to BODIPY in recent years, and numerous derivatives have been synthesized for further applications.¹ Although their spectroscopic properties can be tuned by structural modifications, a relationship between the optical properties and the effects of substituents / positions have not been fully clarified. Notably, the optical properties of BODIPY mainly originate from transitions between HOMO and LUMO. Therefore, systematic investigation of the relationship between substituents and frontier molecular orbitals is expected to enable prediction of optical property changes and to provide rational design guidelines for BODIPY derivatives.² In this study, quantum chemical calculations and multiple regression analysis were employed to quantitatively evaluate how substituent types and positions influence the HOMO–LUMO gap. *Keywords* : Quantum chemical calculation; Density functional theory (DFT) method; Fluorescent probe

BODIPY (Fig. 1) は高い量子収率を示すことや pH や極性によらず蛍光性を保つことから、色素レーザーや生体蛍光プローブなどの幅広い用途に利用されている。また、今後更なる応用が期待され、多くの誘導体が合成されている¹。BODIPY 誘導体は種々の構造修飾によって、その分光学的特性を変化させることが可能であるという特性を持つが、その官能基や置換位置による効果の違いの原因は十分明らかになっていない。他方、本系の主たる光特性はフロンティア軌道で起こる。そのため、モデル化合物を用いて系統的に置換基とフロンティア軌道の関係を調べ、その起源を解明、整理することで構造修飾による光物性の変化等を予測でき、BODIPY 誘導体合成における設計指針が得られると考えられる²。本実験では、BODIPY の置換基種・置換位置によるフロンティア軌道の変化を調べ、重回帰分析を用いて置換基種・置換位置がフロンティア軌道エネルギー差にどの程度定量的に影響しているか調べた。結果は当日発表する。

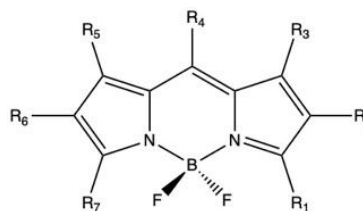


Fig. 1 Structure of BODIPY

1) A. Loudet *et al.*, *Chem. Rev.* **107**, 4891-4932 (2007).

2) M. Asaoka *et al.*, *Chem. Lett.* **46**, 536-538 (2017).