

## 3 近赤外光を利活用する分子の創製と医薬科学への応用

内山 真伸

近赤外とは、可視光線の赤色と遠赤外線との間の領域の光で、およそ 750–2,000 nm の電磁波である。その大きな特徴として、ほとんどの物質と相互作用せず、たいいてい物質を透過できることが挙げられ、光線力学療法などの医薬化学、3D イメージングなどの診断技術への応用が期待されている。これらの技術を実現するにはいづれも、近赤外光と相互作用できる有機分子の開発が必須であるが、一般に有機分子はエネルギーの強い紫外～可視光 (UV/Vis) を利活用するのは得意であるが、近赤外光となると敷居が高いのが現状である。そこで本研究では、「理論化学・合成化学・分光学」を結集して、「最高被占軌道 (HOMO) – 最低空軌道 (LUMO) ギャップを狭くする分子設計」「LUMO を安定化するための置換基選択」「芳香属性の起源」などに着目しながら新奇近赤外クロモフォアの創製に挑んだ。ベンゼン環上にヒドロキシ基を2つ有するベンジフタロシアニン合成し、計算化学・NMR 分光法等の種々の解析の結果、芳香族性の弱いフェノール構造と芳香族性の強いキノイド構造の互変異性の混合物として存在することを明らかにした。また、酸化型構造のベンジフタロシアニンを接触水素還元したところ、定量的に還元型構造のベンジフタロシアニンが得られた。解析の結果、 $20\pi$  電子構造に由来する弱い反芳香族性を有する一方で、近赤外領域に強い吸収帯を持つことが明らかとなった。その他、面内芳香族性の解明、C1 カルボランの芳香族性と  $\sigma$ - $\pi$  共役、スタニルリチウムの新反応の開発を達成したので合わせて報告する。

ベンジフタロシアニンの酸化型・還元型 (上) と互変異性 (下)

