Cyanine 및 Merocyanine색소의 분광특성 및 광전특성(2)

손세모.*권태선.**김성훈.

부산공업대학교 인쇄공학과
*영남대학교 화학과
**경북대학교 공과대학 염색공학과

요 약

헤테로원자(X=O,S,Se)의 변환에 따라 용액상에서 Merocyanine색소 및 Cyanine색소의 헤테로원자X는 p궤도의 원자보다 d궤도의 원자가 공명에 관여하여 공역계확장에 기여하였고, 유전률이 큰 용매 일수록 Merocyanine색소는 장파장으로 흡수극대치가 이동하였다.또 Cyanine색소의 기저상태는 I^- 이온과 정전하 발색단을 가진 이온성 화합물로 되어 있으므로 극성용매에서 I^- 이온의 전하가 색소본체로 전하 이동전이가 발생하여 단파장화 하였다. 고상에서 색소의 농도가 높을 수록 색소분자간의 거리가 가까워져 색소 상호작용이 변화하여 흡수스펙트럼에서는 전체적으로 폭이 넓은 형태로 나타났으며 이것은 농도가 높을 수록 색소분자간의 거리가 가까워져 색소 상호작용이 변화한 때문이라고 생각된다.또한 3차원 형광의 저농도에서 보이지 않는 새로운 스펙트럼이 Cyanine색소에서 나타났으며 이 스펙트럼은 색소고유의 흡수에 기인한 것으로 Eximer형광으로 생각된다. 광전특성에 있었서는 Merocyanine색소가 Cyanine색소보다 활성화에너지가 낮아 전하이동도가 커짐에 따라 높은 광전특성을 나타내었다.그리고 Merocyanine색소 헤테로원자(X)의 비교에서 광전특성은 O<S<Se순으로 높게 나타났다. 이들에 대한 구조변화를 분자궤도법을 이용하여 구조변화를 확인하고 Total Energy를 계산하여 전자이동반응 가는성에 대하여 예측하였다.

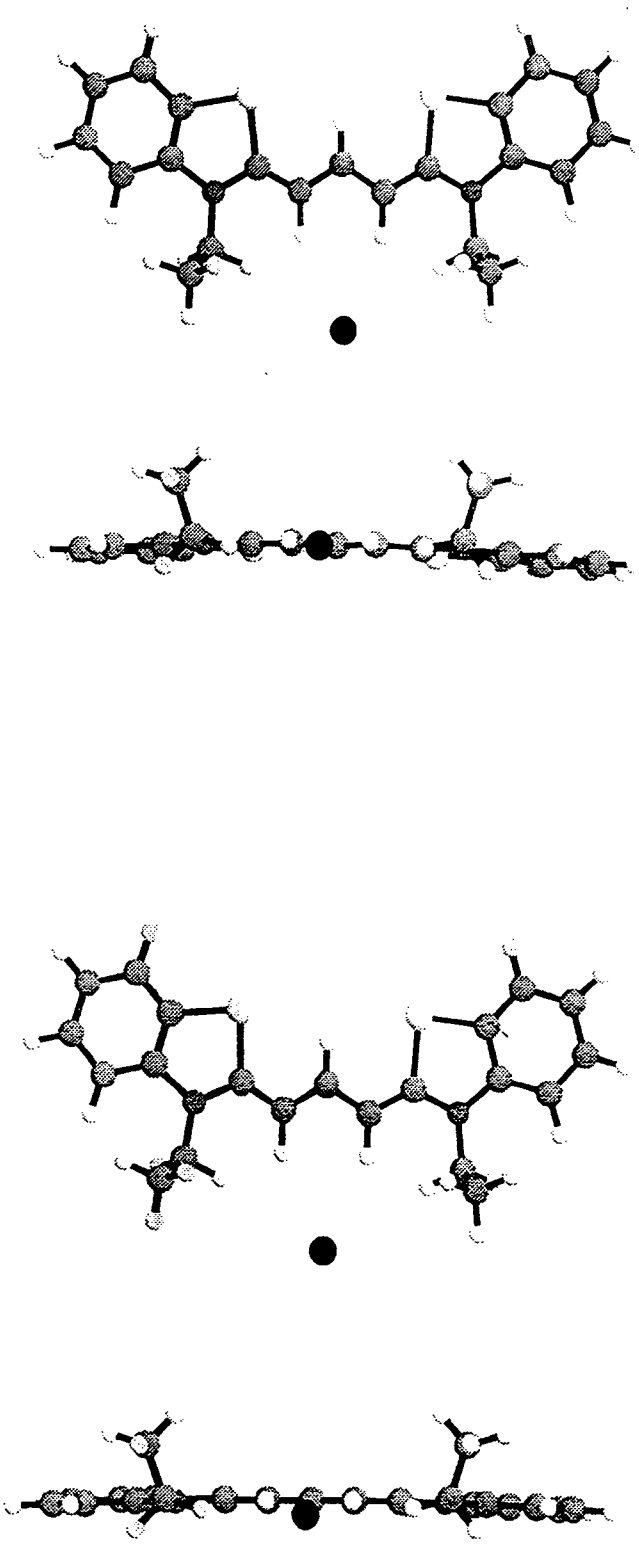

Fig.1 Molecular conformations of Cyanine Dye
Low side : Ground state(S_0)
Upper side : Exicited state(S_1)

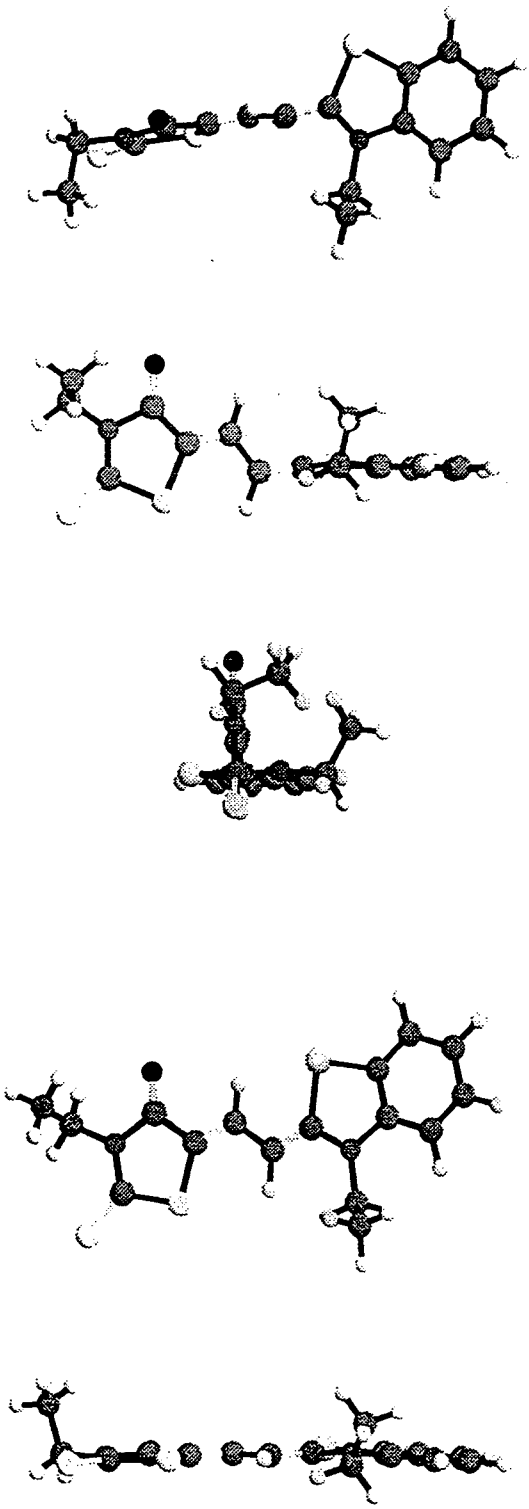

Fig.2 Molecular conformations of Merocyanine Dye
Low side : Ground state(S_o)
Upper side : Exicited state(S_1)

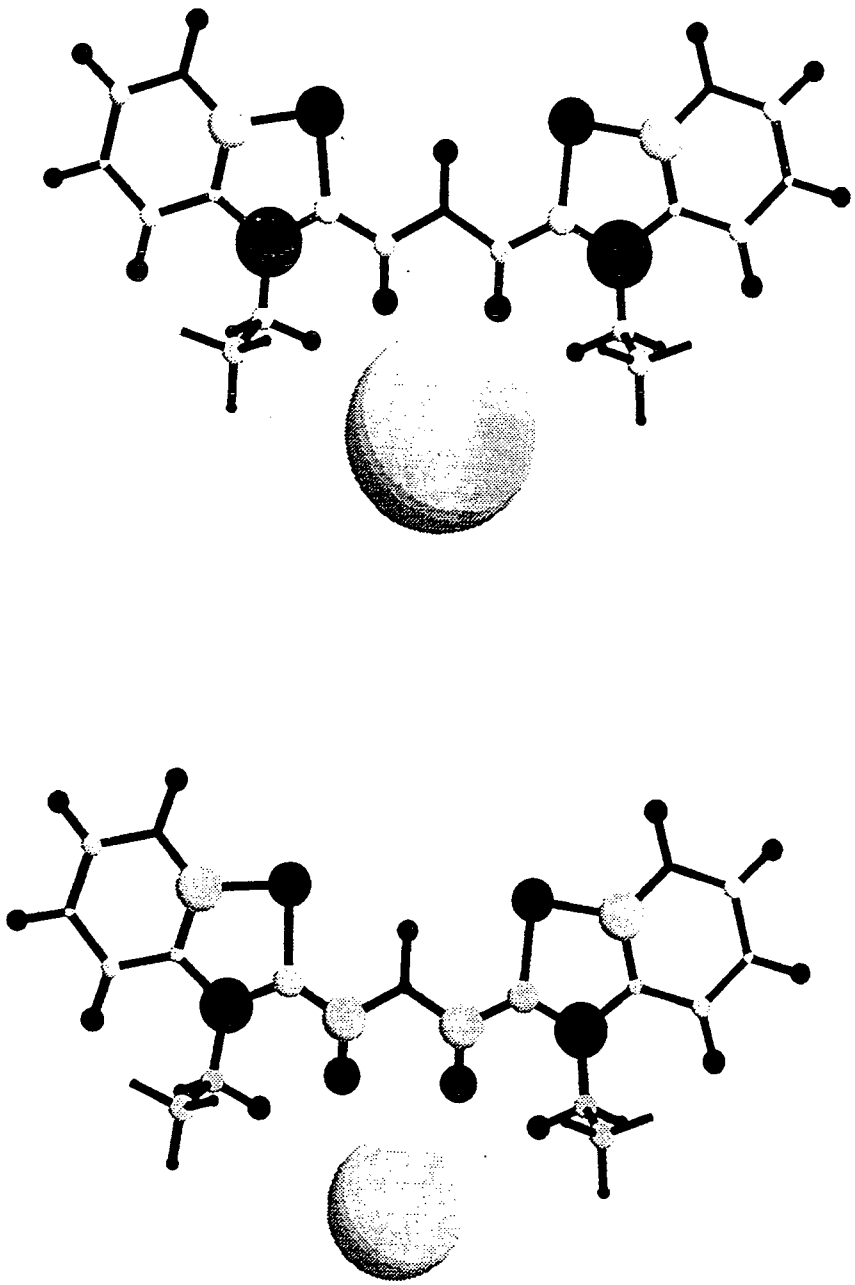

Fig.3 Partial charge distribution of Cyanine Dye
Low side : Ground state(S_o)
Upper side : Exicited state(S_1)

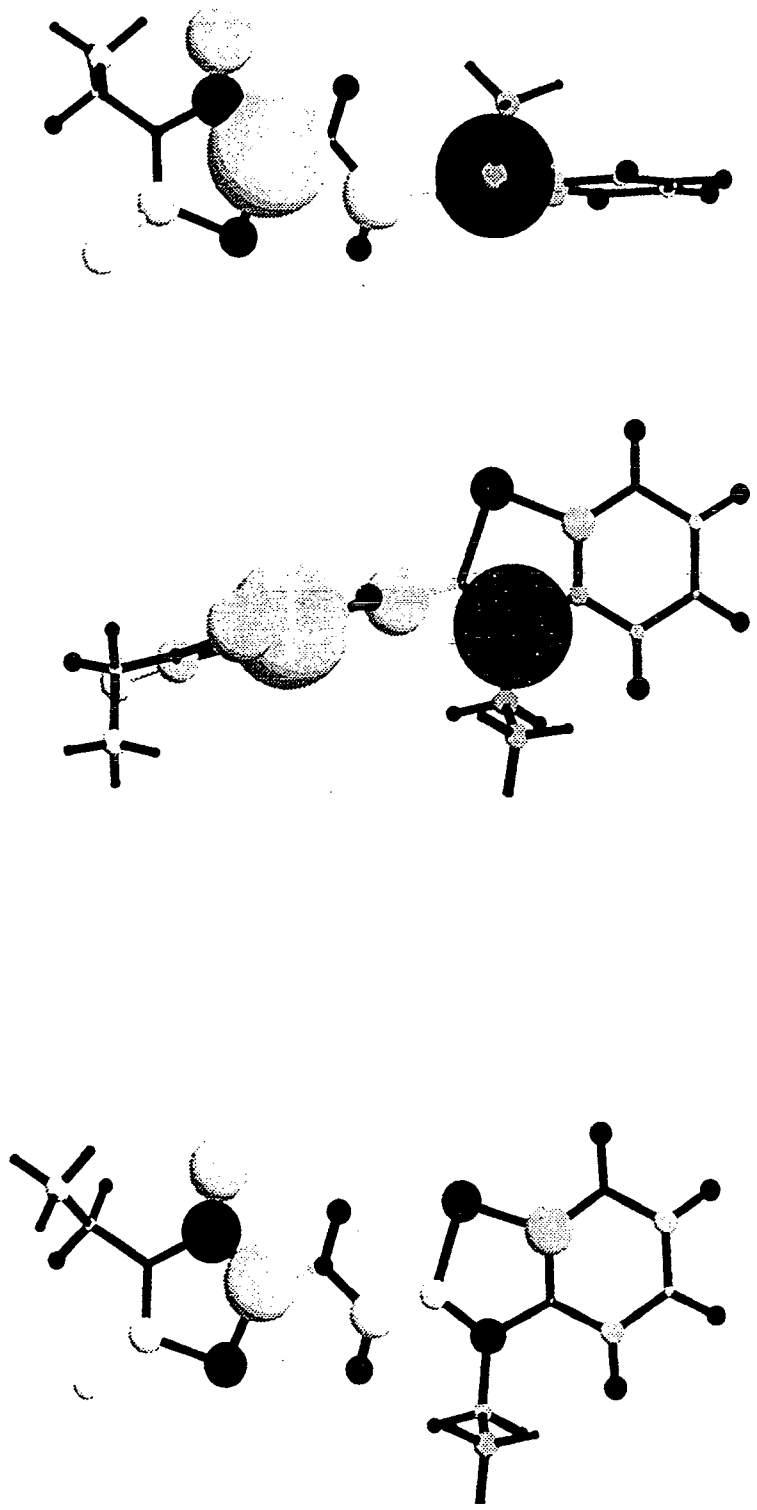

Fig. 4 Partial distribution of meroyanine Dye
Low side : Ground state(S_o)
Upper side : Exicited state(S_1)