

헵타메틴 시아닌색소의 전기화학적 특성 분석

김영성, 신종일¹, 박수열¹, 전 근¹, 손영아*

BK 21 FTIT, Department of Organic Materials and Textile System Engineering, Chungnam National University, Daejeon, 305-764, South Korea

¹Chemical Biotechnology Research Center, Korea Research Institute of Chemical Technology, Daejeon, 305-600, S. Korea

최근, 헵타메틴 시아닌색소(heptamethinecyanine)는 그 적용 범위가 넓기 때문에 많은 연구자들의 관심을 받고 있다. 특히, photo-sensitizers, dye lasers, optical recordings와 storage media 등 다양한 분야에 적용이 가능하다. 헵타메틴 시아닌색소의 주된 특징은 polymethine 사슬에 연결된 cyclohexene 고리에 의하여 근적외선 부근에서 흡수가 이뤄진다는 것이다. 근적외선 색소의 흡수 특성을 HOMO와 LUMO 에너지 준위를 사용하여, 수치화 함으로써 분자간, 분자내 상호작용을 분석 할 수 있다. 따라서, 본 실험은 헵타메틴 시아닌 색소의 치환체에 따른 전기화학적 특성을 순환 전압-전류법(Cyclic voltammetry)과 분자 모델링을 통하여 HOMO와 LUMO의 에너지 준위를 구하고, 치환체 효과가 헵타메틴 시아닌색소에 미치는 전기화학적 특성을 UV-Vis와 계산으로부터 얻어진 에너지준위를 분석하고자 한다.

본 실험에 사용된 Uv-Vis 스펙트럼 측정은 Agilent 8453 UV-Vis spectrophotometer를 사용하였고, 전기화학적 분석 방법인 순환 전압-전류법은 Versa STAT 3 (Princeton allied research in USA)를 사용하였다. 순환 전압-전류법의 측정은 Acetonitrile 용액에 TBAPF₆ (Tetrabutylammonium hexafluorophosphate)를 전해질로 하고, Ag/Ag⁺을 기준전극으로 사용하여 주사 속도를 50mV/s로 하여 측정 하였다. 치환체에 의한 영향을 알아보기 위하여 분자구조 최적화 모델링을 사용하였다. 3차원 분자입체 특성 및 에너지 준위 상태는 Materials studio 4.2를 사용하여 특성을 예측 하였다.

본 연구에서는, 헵타메틴 시아닌 색소의 기본 골격에 각기 다른 치환체를 치환 시켜 치환체에 의한 영향을 전기화학적인 방법인 순환 전압-전류법(Cyclic voltammetry)와 분자 모델링 방법을 사용하여, HOMO와 LUMO에너지 준위 값을 구함으로써 치환체에 의한 영향을 알아보았다. 치환체로는 Dye 1과 Dye 2로 치환된 헵타메틴 시아닌 색소를 사용하였다. 이렇게 얻어진 HOMO/LUMO 에너지 준위 값으로부터 이온화 에너지(I_p)와 전자 친화도(E_a) 또한 구할 수 있는데, I_p와 E_a는 분자 오비탈과 전자전이에 관련된 값들이고, 이는 계산을 통하여 얻을 수 있다. 순환 전압-전류법의 계산 방법은 봉우리 전위(peak potential)와 (onset potential)방법이 있는데, 이 계산을 통한 전위 값들이 봉우리 전위 계산 방법인 onset potential 방법에 비하

여 작은 전위 값으로 나타난다. 하지만 이 두 가지 방법 모두 현재 순환 전압-전류법을 사용하여 HOMO/LUMO 에너지 준위를 측정하는 방법에 쓰이고 있으며, 어떠한 계산 방법이 더 정확하다고는 말 할 수 없지만, 본 실험 결과를 통하여 비교 분석한 결과 onset potential 계산 방법이 봉우리 전위 계산 방법에 비하여 정확하다고 판단된다.

Dye 1과 Dye 2를 순환 전압-전류법으로 측정한 결과 각기 다른 전위를 나타내고 이것을 계산을 통하여 정량화하면 Dye 2가 Dye 1에 비하여 높은 전위 값을 갖음을 알 수 있는데, 이것은 ethyl 에 비하여 surficial 원자의 전자공여성이 더 크다고 할 수 있다.

참고문헌

1. C. Q. Zhu, Y. Q. Wu, H. Zheng, J. L. Chen, D. H. Li, S. H. Li, J. G. Xu, Determination of Nucleic Acids by Near-Infrared Fluorescence Quenching of Hydrophobic Thiocyanine Dye in the Presence of Triton X-100, *Analytical sciences june*, **20**, 945-949(2004).
2. H. S. Youn, S. Y. Park, S. R. Shin, J. I. Shin, S. G. Oh, K. Jun, Y. A. Son, *Fibers and polymers*, submitted, (2009).