

Cyanine 및 Merocyanine색소의 분광특성 및 광전특성에 대한 전자구조와의 상관관계(II)

손세모 · *권태선 · **곽선엽.

부산공업대학교 인쇄공학과

*영남대학교 이과대학 화학과

**부산전문대학 인쇄출판학과

Interrelation on the Electronic Structure and Spectroscopic-Photoelectric Characteristics in the Cyanine and Merocyanine Dye(II)

*Se-Mo Son, *Tae-Sun Gwon, **Sun-Yeop Kawk*

Dept. of Graphic Arts Engineering, Pusan National University of Technology,
Pusan 608-739, Korea

*Dept. of Chemistry, Yeungnam University, Gyongsan, 712-749, Korea

**Dept. of Printing & Publishing, Pusan Junior College,
Pusan 616-737, Korea

Abstract

Spectroscopic and Photoelectric Characteristics in the Cyanine and Merocyanine Dye according to systematically change of their structures were experimentally discussed.¹⁾ As result, in solution, Hetero atoms(X) of Cyanine and Merocyanine dye were participated in resonance X of d orbital rather than X of p orbital, effected in resonance and contributed in extension of conjugated system.

In solid film, new spectra, called eximer-fluorescence, were appeared in 3-dimensional fluorescence of high density of Cyanine dye but not of Merocyanine. The activation energy of conductivity in Merocyanine dye was lower than in cyanine, on the contrary, the drift mobility was higher and the

former in photoelectric characteristics was more effective than the latter.

In this paper, authors investigated the changes of dye structure by molecular orbital method to confirm the results of spectroscopic and photoelectric characteristics in the Cyanine and Merocyanine Dye according to systematically change of their structure, and counted total energy on dihedral angle and dipole moments of dyes in S_0 and S_1 .

1. 서 론

헤테로원자($X=O, S, Se$)의 변환에 따라 용액상에서 merocyanine색소 및 cyanine색소의 헤테로원자 X 는 p궤도의 원자보다 d궤도의 원자가 공명에 관여하여 공역계 확장에 기여하고, 유전율이 큰 용매 일수록 merocyanine색소는 장파장으로 흡수극대치가 이동하였음을 전보에 보고하였다.¹⁾

또한 cyanine색소의 기저상태는 I 이온과 정전하 발색단을 가진 이온성 화합물로 되어 있으므로 극성용매에서 I 이온의 전하가 색소본체로 전하 이동전이 발생하여 단파장화하였고, 고상에서 색소의 농도가 높을수록 색소 분자간의 거리가 가까워져 색소 상호작용이 변화하여 흡수스펙트럼에서는 전체적으로 폭이 넓은 형태로 나타났었다. 광전특성에 있어서도 merocyanine 색소가 cyanine색소보다 활성화에너지가 낮아 전하이동도가 커짐에 따라 높은 광전특성을 나타냈다. 그리고 merocyanine색소 헤테로원자(X)의 비교에서 광전특성은 $O < S < Se$ 순으로 높게 나타났었다. 전보에 이용한 각각의 유기색소는 분자를 구성 단위로하여 각각 독립한 집합체로서 취급하기 때문에 유기반도체의 광전도현상 각각의 분자를 기본으로하여 취급하여야 한다.

따라서 본연구에서는 이들 각각의 색소에 대하여 분자궤도법을 이용하여 분자단위의 구조변화를 확인하고 total energy를 계산하여 전보의 실험결과와 비교하여 전하이동반응에 대하여 검토하였다.

2. 실 험

2.1. 시료 및 장치

본 연구에 사용한 색소의 구조를 Fig.1에 나타내었다. 발색단의 양끝에 질소가 함유된 색

소가 cyanine색소, 질소와 산소가 함유된 색소는 merocyanine색소로서 이들 발색단을 비교하기 위하여 benzoazol환의 헤테로원자(X)에 O,S,Se로 치환된 6종의 색소(일본감광색소연구소 : NKS))를 시료로 하였다.

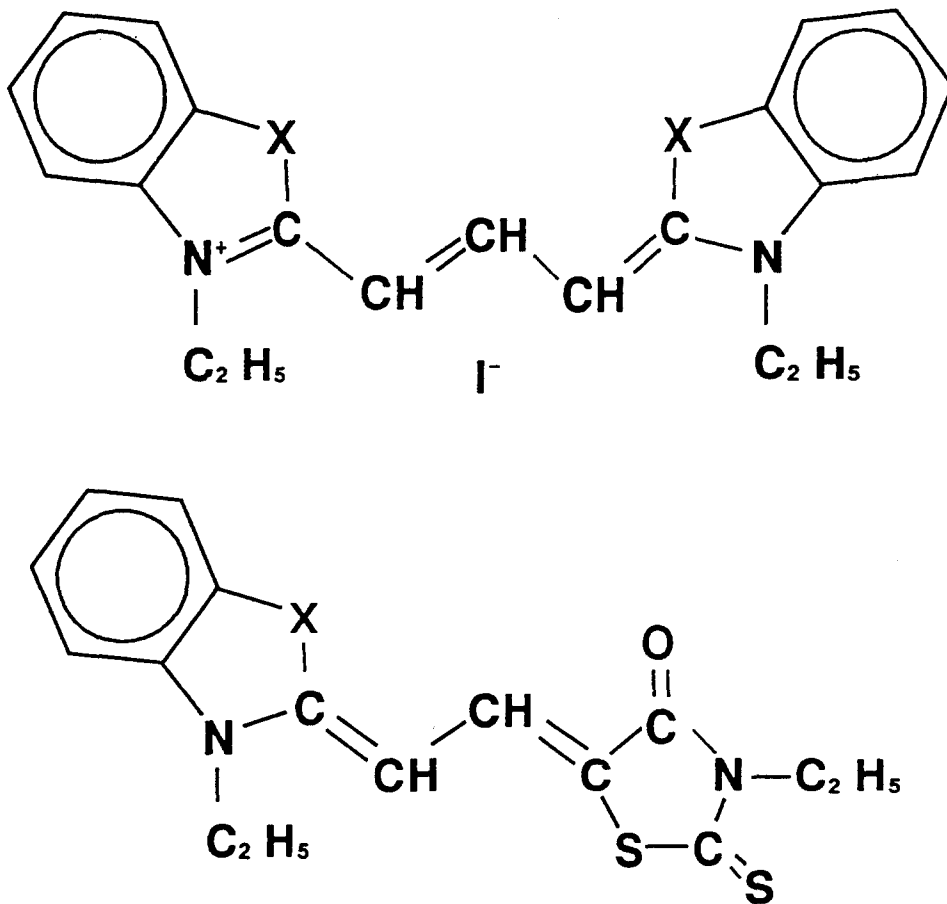


Fig.1 Molecular structures of cyanine and merocyanine dye(X=O,S,Se).

분광 및 광전류에 대한 시료 작성 및 측정방법은 전보에 의존하였으며 분자궤도의 계산을 위하여서는 MOPAC(Molecular Orbital Package : Ver.7.0 Sony-Techtronics CAChe system)을 사용하였다.²⁻⁵⁾

2-2 cyanine 및 merocyanine색소구조의 최적화

각 색소의 기저상태에 대한 최적 안정구조는 초기구조의 좌표를 설정하여 구조최적화

계산을 행하였다.

기저상태에서의 cyanine색소의 카운터 이온인 요소(I)의 위치는 색소본체가 좌우 대칭이므로 정전하는 질소위에 등가적으로 존재한다고 생각되므로 좌우 양쪽의 질소 중간에 놓았다. 이것은 실제로 Wheatley에 의한 X선회절 투영법을 이용한 cyanine색소 결정평가에 의한 결과에서도 카운터 이온은 색소본체의 중간에 존재한다고 보고하고 있으므로 본 실험에서도 카운터 이온을 색소본체 중간에 놓았다.⁶⁾ merocyanine색소의 경우는 카운터 이온을 가지고 있지않으므로 초기구조 좌표설정에는 데이트 베이스 프로그램에 의존하였다. 여기상태에서의 polymethyne계 색소는 광여기에 의하여 methyne측쇄에서 비틀림의 가능성이 있으므로 본 실험에서 사용한 두 색소를 methyne측쇄의 C-C간의 모든 결합상태를 15 ° 씩 회전시켜 그때의 생성열을 산출하여 에너지적으로 가장 낮은 구조를 여기상태의 최적 안정구조로 하였으며 그대표적인 결과를 Fig.2에 나타내었으며 에너지가 가장 낮은 값을 가졌을 때를 색소분자의 구조가 최고안정구조로 하였다.

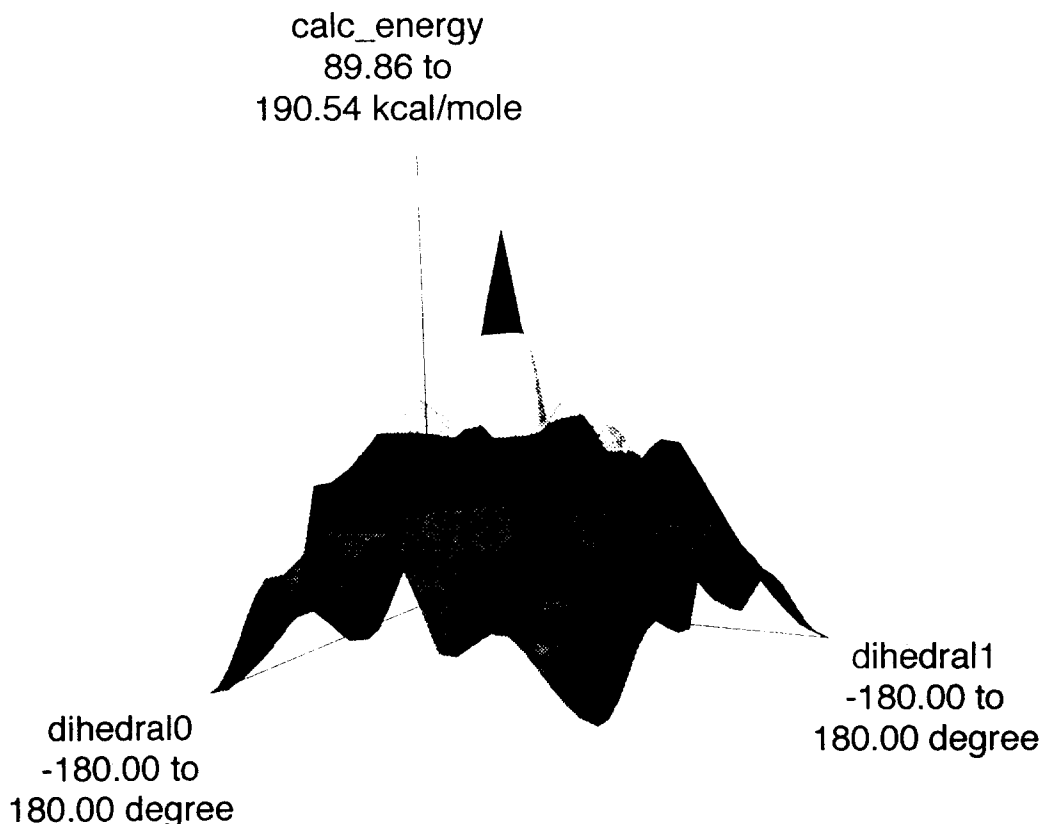


Fig.2 Potential energy map of cyanine dye.

3. 결과 및 고찰

3.1 cyanine 및 merocyanine색소구조의 최적화

Fig.3와 Fig.4는 cyanine와 merocyanine색소의 기저상태와 여기상태의 입체구조를 나타내었다. cyanine색소의 경우는 기저상태와 여기상태의 구조에 있어서 구조변화는 크지 않지만 merocyanine에 있어서는 rhodanine환이 benzoazol환에 대하여 90°회전하여 평면성이 크게 깨어져 있음을 알 수 있다.

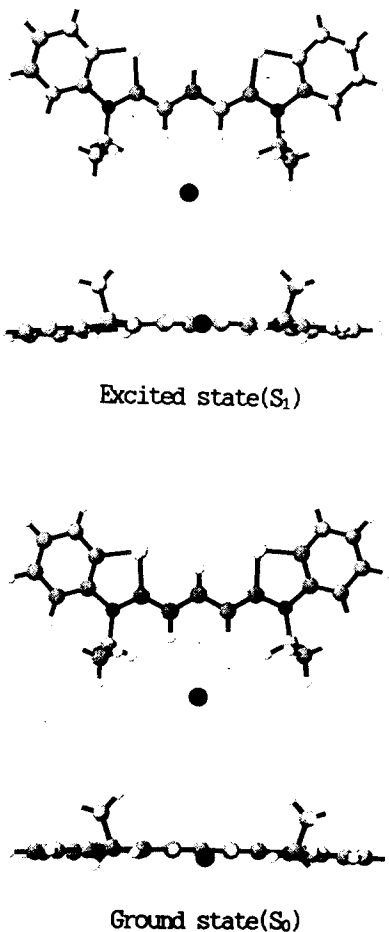


Fig.3 Molecular conformations of cyanine dye.
 Lower side : ground state(S_0)
 Upper side : excited state(S_1)

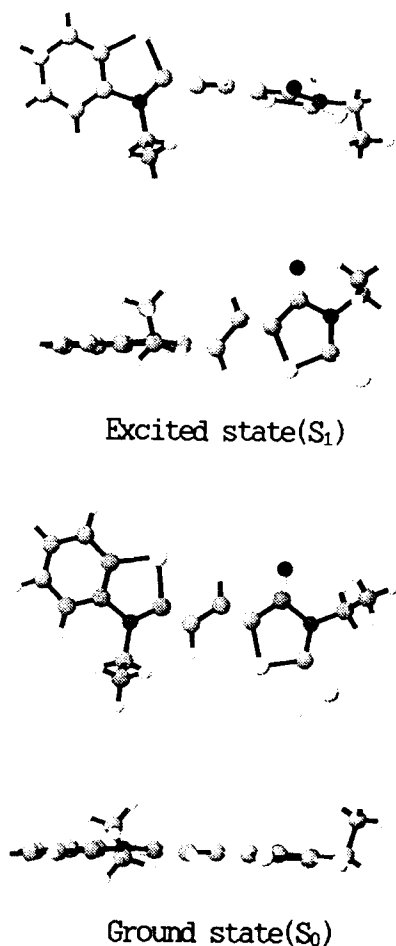


Fig.4 Molecular conformations of merocyanine dye.

Lower side : Ground state(S_0)

Upper side : Excited state(S_1)

또한 기저상태와 여기상태의 발색단에 대한 결합차수에 대한 변화를 Fig.5와 Fig.6에 나타내었다.

cyanine색소의 결합차수는 전체 결합에 있어서 약1.4전후의 값을 가지며 각 원자간 이중결합성이 거의 같음을 알 수 있다. 또한 기저상태와 여기상태간의 결합차수의 변화에 있어서도 큰 변화가 없음을 알 수 있다.

이것은 여기에 의한 화학결합의 변화가 없으며 또한 π 원자가 발색단간을 자유롭게 운동하고 있다고 생각할 수 있다.

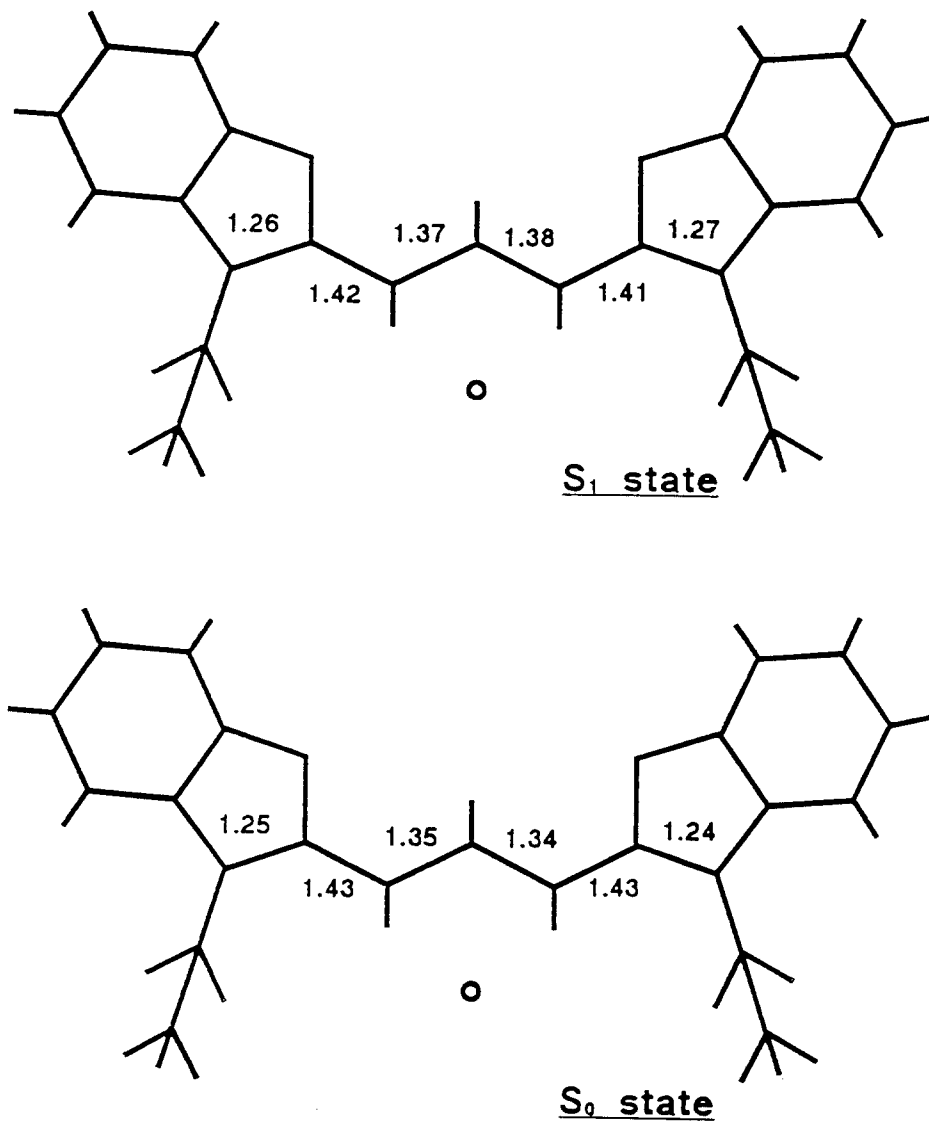


Fig.5 Bond orders of cyanine dye in chromophore.

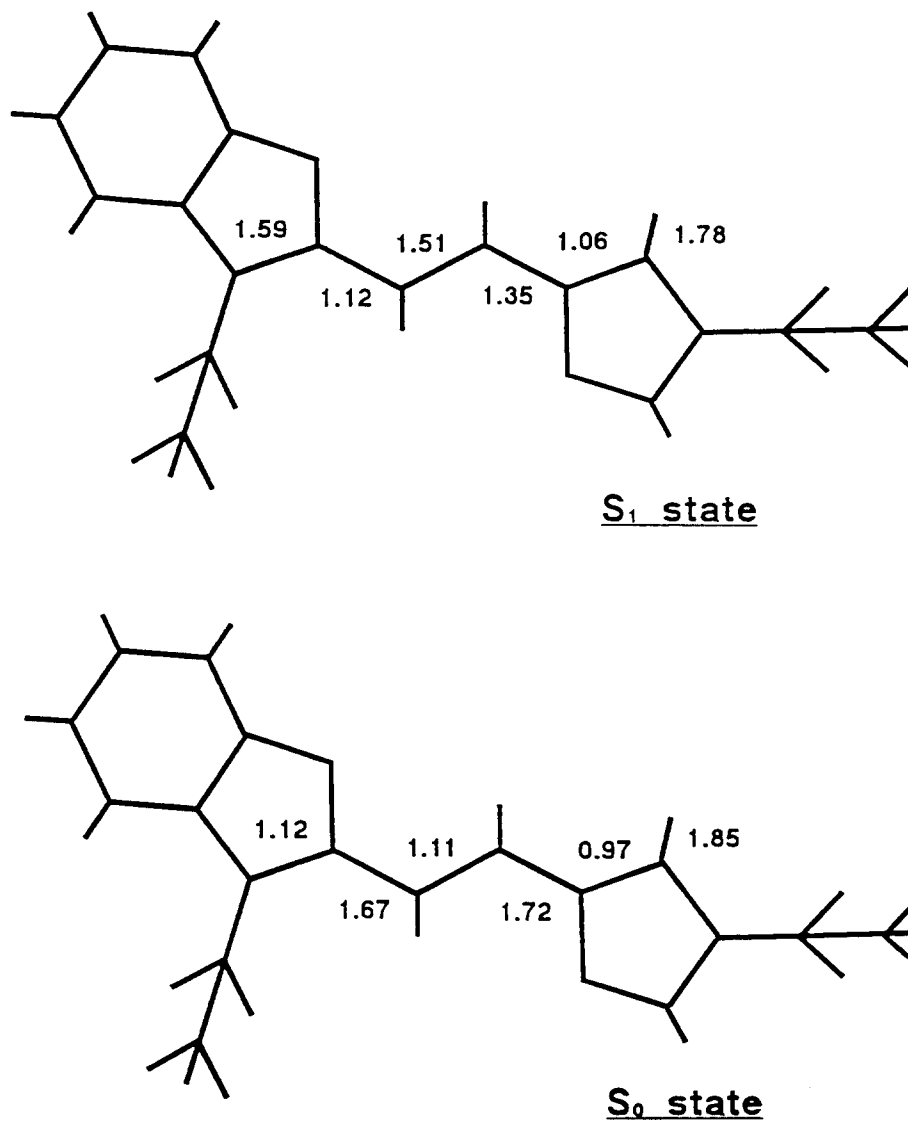


Fig.6 Bond orders of meroyanine dye in chromophore.

그러나 merocyanine 경우 기저상태의 결합차수는 각 결합간에 그 차이가 큰 것은 단결합성과 이중결합성의 결합이 서로 연결되어 있기 때문이며 기저상태와 여기상태에서는 결합성의 순번이 서로 바뀌어 결합교체가 일어나고 있음을 알 수 있다.

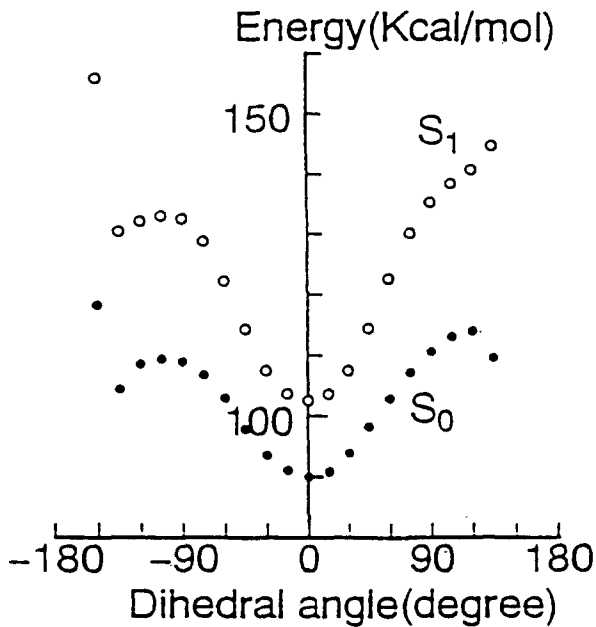


Fig.7 Potential curves dependent on dihedral angle in cyanine dye.

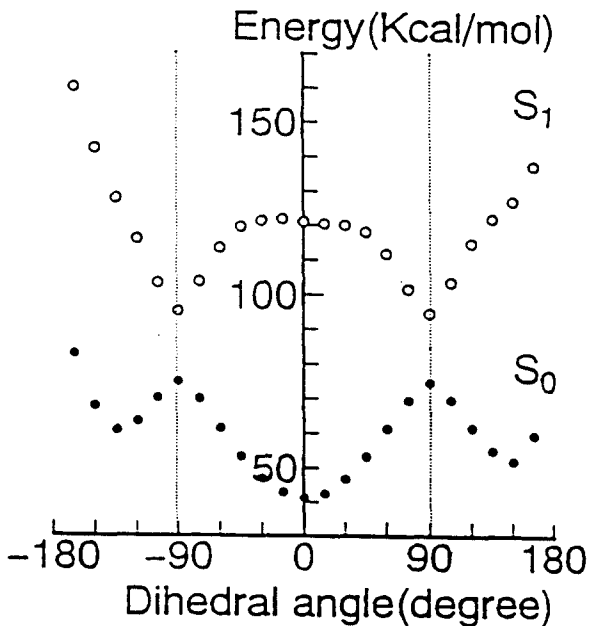


Fig.8 Potential curves dependent on dihedral angle in merocyanine dye.

따라서 merocyanine색소의 발색단은 π 전자의 분포가 불균일하여 분극구조를 가진다고 생각된다. 특히 여기상태에서는 benzoazol환과 결합하고 있는 methyne측쇄 탄소와의 결합차수는 1.67에서 1.12로 감소하여 단결합성으로 결합교체가 일어났다고 생각된다. 이 때문에 후술의 광여기시 과잉에너지에 의한 결합의 비틀림이 발생하였다고 생각된다.

상기 그림의 Fig.7과 Fig.8은 각 색소들의 기저상태와 여기상태에 대한 비틀림 각도에 대한 분자 생성열의 포텐셜곡선이다.

cyanine색소의 기저상태와 여기상태에서의 곡선형태는 동일 형상을 하고 있으며 비틀림 각도가 0° 인 평면상태에서 가장 안정한 상태임을 알 수 있다. 그러나 merocyanine 색소인 경우는 비틀림 각도 0° 인 평면의 기저상태에서 안정한 형태를 취하고 있지만 여기상태가 되면 비틀림 각도 -90° 또는 90° 에서 가장 안정한 상태를 취하고 있음을 알 수 있다. 이와같이 여기상태에서 분자평면이 수직으로 비틀리는 현상은 이중결합을 가진 polyene화합물에서 보여지는 현상이다.⁶⁾ 특히 merocyanine의 경우는 좌우비대칭 발색단을 가지고 있으므로 다음과 같이 공명구조식으로 표현 할수 있다.



merocyanine색소는 좌우 비대칭 발색단을 가지고 있기 때문에 여기상태에서 특히 여기상태에서 극한구조의 특징이 크게 나타났다. HOMO(최고피점궤도)상태에서는 상기의 C_1 과 C_2 의 2P궤도 위상은 서로 일치하여 평면의 결합성 궤도를 형성하고 있으나 광여기에 의하여 전자가 LUMO(최저공궤도)상태로의 천이를 하므로써 반결합성궤도를 형성한다. 이때 역위상궤도가 접하는 평면상태에서 양궤도가 상호작용하지 않는 수직상태가 되므로써 안정화를 취하려고 한다. 이 때문에 merocyanine색소는 기저상태의 평면구조가 여기상태에서는 수직의 비틀림이 발생하였다고 생각된다.⁶⁾

한편 cyanine색소의 경우는 결합교환이 없으며 완전한 등가의 공명구조를 가지고 있으므로 반결합성 궤도는 생기지 않으며 여기상태에서도 평면구조가 그대로 유지 되고 있다고 생각된다. 또한 색소의 카운터 이온도 평면성 유지에 기여한다고 생각된다. 카운터 이온의 경우는 정전하를 가진 질소원자와 이온결합을 가지고 있으며 이 경우도 좌우의 질소원자와는 등가의 정전하를 가지고 있으므로 양쪽 질소와 결합하게 되어 일종의 환을 형성함으로써 평면성의 뒤틀림 억제에 기여하였다고 생각된다.

3.2 분광특성

Table 1은 Stock-shift와 형광양자수율, 형광 등에 대한 실험결과를 Table 2에는 헤테로원자 도입에 의한 5원환의 결합거리와 결합각도에 대한 계산 결과를 각각 나타내었다.

Stock-Shift의 경우는 기저상태와 여기상태의 구조변화에 의한 것으로서 Fig.7과 Fig.8의 포텐셜 곡선과 일치하였다.

Table 1 Photophysic characteristics of cyanine and merocyanine dye in MeOH ¹⁾

	X	ϕf	$\tau(\text{sec})$	Kf	$\tau_f(\text{sec})$	d	ΔS
Cyanine	O	0.073	1.30×10^{-10}	5.64×10^8	1.77×10^{-9}	20.0	15
	S	0.060	3.10×10^{-10}	1.94×10^8	5.16×10^{-9}	24.0	16
	Se	0.043	4.23×10^{-10}	1.02×10^8	9.82×10^{-9}	26.7	18
Merocyanine	O	0.008	9.54×10^{-11}	7.96×10^7	1.26×10^{-8}	28.0	23
	S	0.003	1.62×10^{-10}	1.88×10^7	5.31×10^{-8}	32.7	26
	Se	0.003	3.00×10^{-10}	1.09×10^7	9.17×10^{-8}	35.3	32

ϕf : Fluorescence quantum yields

τ : Lifetime of excited state

Kf : Rate constant

τ_f : Lifetime of fluorescence

d : Half width

ΔS : Stocks shift

stock-Shift는 광흡수한 후 Frank-Condom상태와 여기상태에 대한 최적의 안정구조와의 energy차, 형광발광 직후와 기저상태에 있어서의 최적안정 구조와의 energy차와의 합으로 나타내어지며, 이와같이 energy차이가 나는 것은 분자내부전환을 위한 구조변화에 소비되었기 때문이라고 생각된다.

즉, merocyanine색소는 cyanine색소에 비하면 이 energy차에 의하여 비틀림 구조를 형성하였다고 생각된다. 형광양자 수율에 있어서는 일반적으로 비평면적이 형광성이 낮다고 알려져 있다. 따라서 merocyanine색소는 cyanine색소에 비하여 여기 상태에 있어서 평면성을 파괴하였기 때문에 낮은 양자수율을 가졌다고 생각된다. excimer에 있어서도 merocyanine색소의 경우는 형광을 나타내지 않았지만 이것도 여기상태에 있어서 평면성이 붕괴하였으므로 회합체 형성이 일어나지 않았기 때문이라고 생각한다. 또한, 헤테르 원자가 클수록 Stock-shift가 크지고 형광양자가 양자효율이 저하하는 경향을 나타내었는데 이것도 평면성의 변화에 의한 것이라고 생각된다.

Table 2는 헤테르 원자와 결합하는 2개의 탄소와의 결합각과 결합거리를 나타낸 것으로서, 특히 merocyanine색소의 경우는 보다 큰 헤테르 원자의 도입으로 5원환을 비틀리게 만들고 있음을 알 수 있으며 이 때문에 분광특성의 변화가 발생되었다고 생각한다.

Table 2 Heterocycle conformation

	X	X-C	∠CXC
Cyanine	O	1.377	106.727
	S	1.763	90.659
	Se	1.898	86.874
Merocyanine	O	1.378	111.514
	S	1.758	91.308
	Se	1.938	87.543

X-C : Bond length(Å)

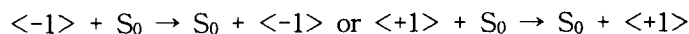
∠CXC : Bond angle(degree)

3.3 광전특성¹⁾

cyanine색소와 merocyanine색소의 이동도와 활성화 energy 등에 대한 실험 결과를 Table 3에 나타내었다. 그 결과 merocyanine색소 쪽이 carrier이동도등 광전특성이 높게 나타났다. 상기의 실험결과를 분자궤도법으로 확인하기 위한 유기색소분자의 광전도과정을 5가지 전자상태 즉 <기저상태 : S_0 >, <1중항상태 : S_1 >, <3중항상태 : T_1 >, <cation radical : +1>, <anion radical : -1> 등으로 가정하였다. 특히 본 실험에 사용한 유기색소의 경우에 있어서의 carrier이동은 동일 분자간 라디칼 이온상태의 이동이라고 가정하여 다음 식과 같이 라디칼 이온 상태와 S_0 상태와의 전자이동 반응하므로서 그 과정이 되풀이 된다고 생각하였다.

Table 3 Photoconductive characteristics¹⁾

	X	$I_p - I_d$	I_p / I_d	$[dI_d / dV^2]$	$\mu_d(\text{cm}^2 / \text{V} \cdot \text{sec})$	$E_a(\text{eV})$
Cyanine	O	2.61×10^{-11}	18.5	2.72×10^{-10}	9.83×10^8	0.872
	S	4.94×10^{-13}	1.9	2.88×10^{-11}	6.09×10^{-11}	0.760
	Se	1.51×10^{-10}	268.6	2.11×10^{-11}	4.94×10^{-11}	0.715
Merocyanine	O	7.62×10^{-7}	21.1	1.99×10^{-9}	6.33×10^{-7}	0.645
	S	1.35×10^{-9}	82.0	5.55×10^{-11}	4.33×10^{-8}	0.630
	Se	5.69×10^{-9}	882.0	4.17×10^{-12}	2.12×10^9	0.529

 $I_p - I_d$: Difference between I_p and I_d I_p / I_d : Photoconductive sensitivity $[dI_d / dV^2]$: Slope of I_d vs V^2 $\mu_d(\text{cm}^2 / \text{V} \cdot \text{sec})$: Drift mobility $E_a(\text{eV})$: Activation energy for conductivity

좌측은 전자가 이동하는 경우이고 우측은 정공이 이동하는 경우이다.

그러나 상기의 경우는 동일 분자간 전자이동이므로 S_0 와 이온 라디칼의 에너지 차이 즉 자유에너지 ΔG 는 0 이 되어 버리므로 이론적으로는 어느 색소분자를 이용하여도 전자이동 반응이 일어날 수 있는 가용성은 동일 하게된다. 그러나 carrier가 정공이면 $\langle +1 \rangle \rightarrow \langle S_0 \rangle$ 에 있어서 방출되는 에너지와 $S_0 \rightarrow \langle +1 \rangle$ 에 있어서 흡수되는 에너지는 서로 다르다고 생각된다. 이것을 Potential곡선으로 Fig.9에 나타내었다. 기저상태에서 cation라디칼로의 천이는 수직으로 일어나며 천이에 필요로하는 에너지는 $\Delta E(S_0 \rightarrow +1)$ 이며 이것은 $\Delta E(S_0 : +1)$ 보다 크며 기저상태로 되돌아 올때는 $\Delta E(+1 \rightarrow S_0)$ 의 에너지를 방출하게 된다. 여기서 $\Delta E(S_0 \rightarrow +1)$ 와 $\Delta E(+1 \rightarrow S_0)$ 에서 각각의 에너지 차의 합 즉 $(\Delta E_1 + \Delta E_2)$ 는 수직 천이상태의 구조에서 안정한 전자상태를 가지는 구조로 변화하기 위하여 소비되는 에너지라고 생각된다. 따라서 동일분자간의 전자이동반응은 구조변화에 필요로하는 에너지를 외부로부터 받아 들이지 않는 이상 일어나지 않는다고 생각할 수 있으며 이와는 반대로 $(\Delta E_1 + \Delta E_2)$ 가 적은 분자일수록 carrier이동이 쉽게 일어난다고 생각된다.

$(\Delta E_1 + \Delta E_2)$ 가 적은 분자는 기저상태와 이온라디칼의 potential이 낮은 상태 즉 기저상태와 이온 라디칼 상태에서 구조변화가 적은 분자를 의미하게된다. 그러므로 기저상태와 이온 라디칼 상태에서 구조변화를 일으키지 않는 분자가 carrier 이동을 위한 활성화에너지는 적으므로 이동도가 높게 된다고 생각되며 이것이 높은 이동도를 갖게하는 분자설계의 기본이된다.

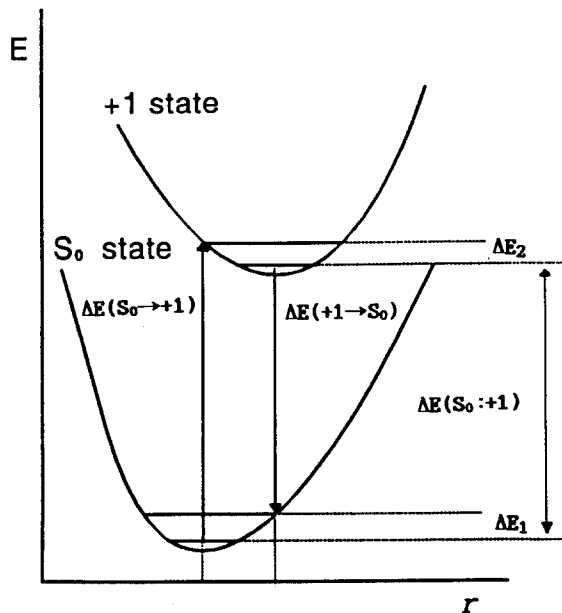


Fig.9 Potential curve of S_0 and $+1$.

Table 4에 각색소와 대표적인 이동제인 triphenylamine(TPA)의 $\Delta E(S_0 \rightarrow +1)$ 와 $\Delta E(+1 \rightarrow S_0)$ 등의 계산값을 나타내었다. 여기상태와 cation라디칼 사이의 정공이동에 있어서 구조변화를 위한 에너지(ΔE_h)는 실험적 결과를 나타낸 Table 3의 활성화에너지 (E_a)와 비슷한 값을 가지고 있음을 알 수 있다.

또한 이들의 값은 전체적으로 merocyanine색소가 cyanine색소보다 작으며 실험적 방법과 이론적 방법이 일치함을 알 수 있었다. 그러나 실험적 방법에서는 헤테로원자의 치환에 따라 $O > S > Se$ 순으로 이동도가 높았으나 계산방법에서는 그 역으로 나타났으며 또한 anion 라디칼의 전자이동 에너지쪽이 정공이동 에너지보다 낮게 나타났다. 이것은 일반적인 유기물의 경우와는 반대의 경향으로써 실험치와 계산치의 정밀도 차이로 생각된다.

Table 4 Total energy gaps(eV).

	X	$(S_0 \rightarrow +1)$	$(+1 \rightarrow S_0)$	ΔE_h	$(S_0 \rightarrow -1)$	$(-1 \rightarrow S_0)$	ΔE_e
Cyanine	O	4.68	-3.28	1.40	-2.74	3.17	0.43
	S	4.89	-3.89	1.00	-3.13	3.37	0.24
	Se	4.60	-3.61	0.99	-3.28	3.58	0.30
Merocyanine	O	7.98	-7.10	0.88	-1.91	2.33	0.42
	S	7.86	-7.22	0.64	-2.09	2.57	0.48
	Se	7.62	-7.30	0.32	-2.11	2.59	0.48
TPA		8.00	-7.29	0.71	-0.11	0.44	0.33

$\Delta E_h, \Delta E_e$: Energy for structural change(hole or electron)

한편 광전특성에 있어서 carrier생성이 일어나기 위하여서는 여기상태와 anion 라디칼과의 에너지차 즉 $\Delta E(S_1 : -1)$ 가 보다 크든지 아니면 여기상태와 anion 라디칼과의 에너지차 즉 $\Delta E(S_1 : +1)$ 가 적어야 한다.

Table 5에 여기상태와 라디칼 상태의 에너지차의 계산값을 나타내었다. $\Delta E(S_1 : -1)$ 의 경우는 cyanine색소에 비하여 merocyanine 색소는 높은 값을 나타냈으며 이것은 여기상태에서 전자수용성이 강한 이온대를 형성하기 쉽다고 생각된다. 또한 헤테로원자의 치환이 있을 경우는 $O < S < Se$ 순으로 높게 나타났지만 merocyanine의 경우는 거의 차이가 나타나지 않았다. $\Delta E(S_1 : +1)$ 의 경우는 오히려 cyanine색소 쪽이 작은 값을 나타내었으며 이것은 전자공여성의 이온대 형성이 일어나기 쉽다고 생각되며 헤테로원자의 치환이 있을 경우는 실험 결과의 반대현상이 일어났다. 이러한 결과는 merocyanine색소의 전자수용성이 cyanine색소의 전자공여성보다 강하기 때문에 쉽게 이온대를 형성하여 높은 광전도성

을 가졌다고 할 수 있겠지만 실험결과는 merocyanine색소가 압도적인 광전도성을 나타내므로 상기의 설명으로는 불충분하다고 생각되어 각 색소의 기저상태와 여기상태의 부분전하 분포를 측정하였다.

Table 5 Energy gaps between excited and radical state.

	X	$E(S_1 : +1)$	$\Delta E(S_1 : -1)$
Cyanine	O	3.18	3.42
	S	3.84	3.70
	Se	4.09	3.93
Merocyanine	O	4.98	4.59
	S	5.31	4.52
	Se	5.33	4.56

Fig.10과 Fig.11은 각색소의 부분전하 분포를 나타내었다.부분 전하분포는 일반적으로 원자가 가지는 전자수에 대하여 전자의 과부족 정도를 나타내는 것으로서 Fig.10과 Fig.11에서 검은색 부분은 전자 부족부분,흰색 부분은 전자 충전부분으로 나타내었다.특히 여기상태에서 cyanine색소가 전하의 편중이 적은 반면 merocyanine색소의 경우는 rhodanine 환 부분에서 전자충만이 뚜렷하고 benzoazol환 부분에서는 전자부족 현상이 뚜렷이 나타나고 있음을 알 수 있다.

또한 각 색소의 기저상태와 여기상태의 쌍극자 모멘트를 계산하여 Table 6에 나타내었다. 기저상태에서는 오히려 cyanine색소가 merocyanine색소 보다 높은 쌍극자 모멘트를 나타내었다.이와같은 결과는 merocyanine색소가 여기상태에서는 전하가 분리된 상태로 존재하고 있음을 알 수있다.

이것은 또한 전보의 색소에 대한 용매효과와 매우 일치함을 알 수 있으며 이와같은 merocyanine색소의 전하 편중이 merocyanine색소가 높은 광전특성을 갖도록 하는 원인이라고 생각한다. 즉 일반적인 이온대생성은 어떤 특정 분자의 전자기동에 의하여 형성되지만 merocyanine색소의 여기상태는 여기상태에서 이미 의사적 이온대를 형성하고 있으므로 새로운 이온대 형성을 위한 전자기동이 없으므로 그만큼 carrier생성에 유리한 입장에 있다고 생각된다.

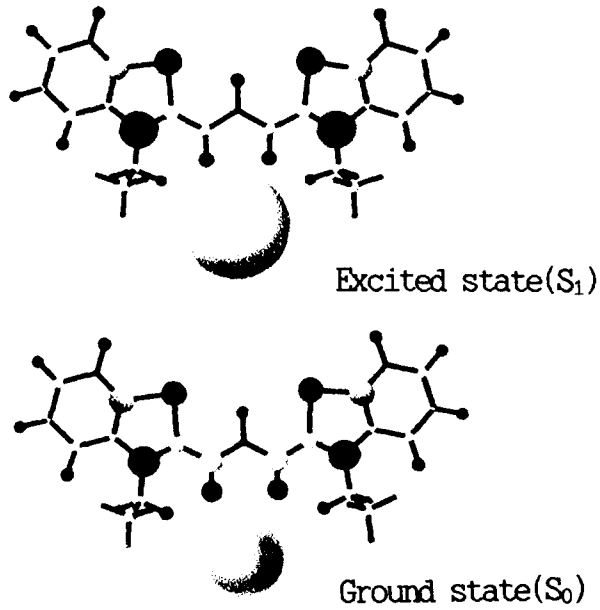


Fig.10 Partial charge distribution of cyanine dye.
Lower side : ground state(S₀)
Upper side : excited state(S₁)

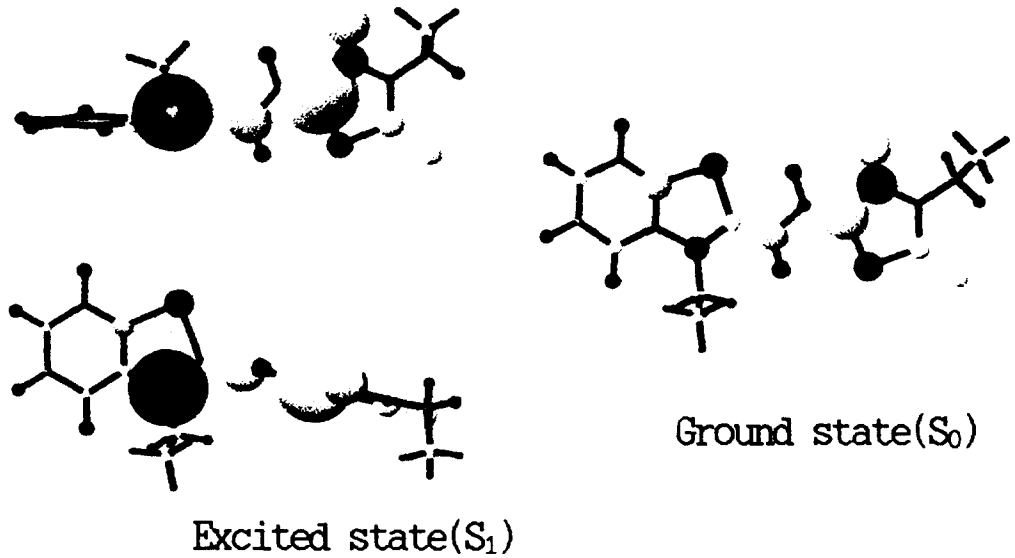


Fig.11 Partial charge distribution of merocyanine dye.
Lower side : ground state(S₀)
Upper side : excited state(S₁)

Table 6 Dipole moments in S_0 and S_1

	X	S_0	S_1
Cyanine	O	11.67	14.80
	S	10.84	14.90
	Se	10.16	15.91
Merocyanine	O	7.22	21.73
	S	6.41	22.16
	Se	6.24	22.62

4. 결 론

Cyanine 및 Merocyanine색소의 헤테로원자(X=O,S,Se) 변화에 따른 분광특성 과 광전 특성의 실험결과를 확인하기 위하여 분자궤도법을 이용하여 얻어진 결론 다음과 같다.

1. merocyanine색소가 여기상태에서 cyanine색소보다 형광성이 낮게 나타난 이유는 merocyanine색소 구조의 평면성 붕괴때문인 것으로 생각된다.
2. merocyanine색소가 cyanine색소보다 높은 광전특성을 나타낸 이유는 분자 궤도계산 법에 의한 결과 여기상태에 있어서 전하분리구조를 취하므로서 carrier생성에 유리한 구조를 취하고 있기 때문인 것으로 생각된다.

참 고 문 헌

1. 손세모, 권태선, 김성훈, 高橋 英雄, 廣橋 亮, 한국화상학회지, 1(1), 28(1996).
2. 平野恒不, 田辺和俊 編著; “分子軌道法MOPAC”, KAIBUNDO刊行,(1994).
 - a) MOPAC Ver. 6.0, J.J.P. Stewart, QCPE #455
 - b) JCPE Newsletter, Vol. 2, No. 26(1991) and JCPE #P015
3. 大野空一 著: “量子物 理化學”, 東京大學出版學會(1991).
4. 時田 澄雄: “カラー-ケミストリ” 丸善, (1982).
5. 鐸木啓三, 菊池 修 著: “電子の軌道”, 共立出版(1990).
6. 志摩健介 著: “有機化學 勵起狀態”, 廣川書店 (1990).