

凝集誘起発光過程の自由エネルギープロファイル解析

(千葉工業大学) 山本 典史

norifumi.yamamoto@p.chibakoudai.jp

有機発光材料は、高輝度化することでエネルギー消費量を軽減できることから、高い蛍光量子収率を示す発光材料の新規創製が必要不可欠となる。しかし蛍光分子の多くは、希薄溶液に分散した状態では強い発光を示しながら、高濃度溶液や固体などの凝集状態では、部分的にあるいは完全に消光してしまう。この現象は濃度消光と呼ばれており、周囲の分子との相互作用によって無輻射緩和過程を経て光励起エネルギーを失活することが原因である。濃度消光は、フィルム基盤や固体薄膜中などで蛍光量子収率の著しい低下を招く原因となり、発光材料の開発における大きな障害となる。

近年、凝集誘起発光 (Aggregation Induced Emission; AIE) を示す色素が注目を集めている。AIE を示す物質は、濃度消光とは逆の挙動を示し、希薄溶液中に分散した状態では無蛍光であるが、固体などの凝集状態では強く発光する。このために AIE 色素は、濃度消光の問題を克服する革新的な有機発光材料・高次光機能性材料として期待される。医療分野においても、タンパク質などを AIE 色素で標識することで、凝集過程や環境応答を蛍光顕微鏡などで観察することが可能となる。AIE を応用してタンパク質凝集体を高感度に検出する技術を開発できれば、アルツハイマー病やパーキンソン病など、タンパク質の異常凝集が原因となる病気の早期診断法・治療法の確立にも貢献できる。

一方で、従来の AIE 色素は、偶然に発見された分子を骨格とする誘導体がほとんどである。新しい AIE 色素が発見されても、凝集状態での発光強度が弱く、これを高効率化することが困難な場合が多い。この要因としては、AIE のメカニズムには不明な点が多く、AIE 色素を開発するための基礎が確立していないことが問題として挙げられる。

発表者はこれまでに、シアノスチルベン誘導体 CN-MBE [1,2] とジフェニルジベンゾフルベン DPDBF [3] の理論解析に取り組み、AIE を発現する凝集状態における非断熱遷移の基本的な描像を明らかにしている。現在、従来とは異なる骨格構造をもち、円偏向性を有する新規 AIE 分子である三脚巴状分子 [4] について、実験と理論の協働のもと、光機能性の高効率化に取り組んでいる。本講演では、発表者のこれまでに取り組んできた事例などに基づき、光機能材料を合理的に設計・最適化するための各種分子シミュレーション手法の活用について、参加者の皆様と意見交換ができれば幸いである。

[1] Yamamoto, N. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol. 23, pp. 1317-1324 (2021)

[2] Yamamoto, N. *J. Phys. Chem. C*, Vol. 122, pp. 12434-12440 (2018)

[3] Yamamoto, N. *J. Phys. Chem. A*, Vol. 124, pp. 4939-4945 (2020)

[4] Ueda, M.; Kokubun, M.; Mazaki, Y. *ChemPhotoChem*, Vol. 4, pp. 5159-5167 (2020)