

シアノスチルベン誘導体の凝集誘起発光についての理論的研究

Theoretical Insights into the Mechanisms of Aggregation-Induced Emission in a Cyanostilbene Derivative

H30海自75

派遣先 アメリカ化学会 年会(アメリカ・ボストン)

期 間 2018年8月18日～2018年8月25日(8日間)

申請者 千葉工業大学 准教授 山 本 典 史

海外における研究活動状況

研究目的

申請者はこれまでに、代表的な凝集誘起発光色素(AIEgen)であるシアノスチルベン誘導体のAIE過程を分子シミュレーション技術によって解析し、そのメカニズムを明らかにしている。本発表では、次世代エレクトロニクス技術を担う発光材料として注目されているAIEgenについて、申請者が解明したAIEのメカニズムを報告し、この知見に基づくAIEgenの合理的分子設計指針に関して議論をおこなうことを目的として当該学会に参加した。

海外における研究活動報告

有機発光材料は、エレクトロルミネッセンス(EL)、色素増感太陽電池、光記録媒体、医療診断用蛍光プローブなど、次世代エレクトロニクス技術を担う重要な物質である。この場合、発光を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創製が必要不可欠となる。しかしながら蛍光分子の多くは、希薄溶液に分散した状態では強い発光を示しながら、濃厚溶液や固体などの凝集状態になると消光してしまうことがよく知られている。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り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、実際に素子として用いるフィルム基盤や固体薄膜中などの凝集状態において著しい蛍光量子収率の低下を招くため、発光材料の開発において大きな障害となっている。

凝集誘起発光(AIE: Aggregation Induced Emission)は、濃度消光とは全く逆の発光挙動を示す現象である。AIEを示す蛍光物質(AIEgen: AIE luminogen)は、希薄溶液に分散している状態では無蛍光性であるが、濃厚溶液や固体などの凝集状態になると強い蛍光を発するようになる。このためAIEgenは、従来の発光材料における濃度消光の問題点を克服し、次世代エレクトロニクス技術における未踏分野を開拓できる新しい有機発光材料として注目を集めている。しかしながら、これまでに報告されているAIEgenは偶然に発見された分子(トリフェニルシロール、テトラフェニルエチレン、シアノスチルベンなど)を基本骨格とする誘導体がほとんどである。この要因として、AIEのメカニズムには不明な点が多く、AIEgenを合理的に設計するための基礎が確立していないことが問題点として挙げられる。

申請者はこれまでに、代表的なAIEgenのひ

とつであるシアノスチルベン誘導体CN-MBEについて、量子化学計算と分子動力学法を組み合わせた解析をおこない、そのAIEメカニズムの解明に取り組んできた。量子化学計算の結果、CN-MBEは、基底電子状態 (S_0) と励起状態 (S_1) のポテンシャルエネルギーが分子内C=C結合軸周りの回転に伴って近接し、ねじれ角度 θ が90度付近となる地点で交差することが明らかになった。希薄溶液ではこのC=C結合軸の回転がほぼバリアレスで起こり、この S_0/S_1 交差点を経由した光励起エネルギーの無輻射失活が起こる。一方で、分子同士が密に集合した凝集状態では、C=C結合軸の回転が抑制されることで、蛍光消失に至る経路がエネルギー的に極めて不利となり、強い発光を呈することを明らかにした。

申請者が解明したAIEのメカニズムは、分子シミュレーション技術を用いたAIEgenの合理

的分子設計を可能にするための重要な手がかりとなる。AIEgenを自在に分子設計することができれば、AIE効果を付与した様々な発光材料の実現が可能となり、次世代エレクトロニクス技術における未踏分野の開拓に繋がると考えられる。さらに、AIEgenの合理的分子設計指針が確立されれば、高い蛍光量子収率・優れた光エネルギー変換効率をもつ有機EL素子や色素増感型有機太陽電池の実用化など、有機エレクトロニクス分野への多大な波及効果が期待される。さらに、AIEgenを応用してタンパク質凝集体を高感度に検出する新しい分子イメージング技術を確立できれば、アルツハイマー病などのタンパク質の異常凝集が原因となるアミロイド病の病態機序につながる可能性があり、医療分野に対しても大きな波及効果が期待される。