

テトラフェニルエチレンの凝集誘起発光ダイナミクスに関する理論的解析  
Theoretical Analysis of Aggregation-Induced Emission Dynamics of Tetraphenylethylene

千葉工業大学 與五澤 蓮

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、テトラフェニルエチレン (TPE 1) の凝集誘起発光ダイナミクスに関する理論的解析に取り組んだ。

近年、単体では発光しないが、分子同士が多数凝集すると強く発光する特性を持つ新しいタイプの蛍光色素が注目されている。この現象は凝集誘起発光 (Aggregation Induced Emission; AIE) と呼ばれる。AIE が発現する系では、分子が凝集するというシンプルな現象のもとで非断熱遷移過程が制御されて、その発光効率が高まると考えられるが、メカニズムの詳細は明らかではない。

本研究では、AIE を示す代表的な色素分子である TPE を対象として、非断熱遷移の制御という観点から、AIE ダイナミクスの理論的な解析に取り組んだ。

本研究で取り組んだ解析により、TPE について、基底状態と励起状態が交差する円錐交差点の構造は、ethylenic C=C 結合部位の二面角が  $90^\circ$  近傍に遷移し、pyramidalization することが明らかになった。また、自由エネルギープロファイルから、希薄溶液中でこの分子が発光しない原因は、照射後、励起した Franck-Condon 点から円錐交差点へ自発的に緩和することで無輻射緩和するためであることが明らかになっている。さらに凝集構造中では、光励起後、分子の構造変化を経て円錐交差点に至る無輻射経路がエネルギー的に不利となり、発光を示すことが明らかになっている。

次年度以降、TD-DFTB-MD 計算を用いて、THF 溶液中と凝集状態における TPE の AIE ダイナミクスの解析に取り組む予定である。凝集状態では、周囲の分子との立体障害のため ethylenic C=C 結合の回転は起こらず、 $S_1/S_0$  円錐交差点に到達しないと予想される。これらの解析に基づいて、TPE の AIE メカニズムを明らかにすることを目指す。

[1] Zhao, Z., et al, *J. Mater. Chem.*, Vol. 22, p. 23726 (2012)