

電荷移動エキシマーの形成に基づく電気化学的に誘起された Hyperfluorescence
Electrochemically induced hyperfluorescence based on the formation of charge-transfer
excimers

京都大学 化学研究所 分子材料化学研究領域

梶 弘典

研究成果概要

電気化学と発光を組み合わせた電気化学発光(ECL)は、免疫測定や診断における生体分子の高感度検出、食品安全分析、環境監視などで活用されている。この ECL 技術を照明・ディスプレイ用途へ拡張し、電気化学発光デバイス(ECLD)の性能を向上させるために、新規発光材料、電極構成、動作機構が検討されてきた。強い ECL には、豊富なラジカルイオンの生成と迅速な放射再結合が一般に必要であるが、ラジカルイオンの蓄積は発光材料を劣化させる副反応が誘起され得るため、最大輝度やデバイス寿命が制限される現状にある。

熱活性化遅延蛍光(TADF)材料は、希少元素を用いずに、すべての励起子を光に変換可能なことから注目されている。ECLD においても、TADF 発光体により ECL 効率が最大 4 倍向上することが示されているが、最大到達輝度や動作安定性の向上には限定的な効果しか得られていない。本研究では TADF 分子である TpAT-tFFO 及び TpATtBu-tFFO (Fig. 1a)について、電荷移動(CT)型エキシマーを電気化学的に生成することで、高速な逆項間交差(RISC)と蛍光分子へのエネルギー移動を起こし、高効率な Hyperfluorescence が得られた(Fig. 1b)。

TpAT-tFFO 溶液の濃度依存 PL スペクトルから、濃度が高くなるにつれて発光波長が長くなることが示された。これは、モノマーの発光からエキシマーへの発光に遷移することを示している。また、分子動力学及び量子化学計算を行うことで、自発的に TpAT-tFFO のエキシマーが形成され、分子内 CT 遷移による S_1 エネルギーの減少が示された。本研究では、量子化学計算ソフトウェア Gaussian16 及び分子動力学計算ソフトウェア LAMMPS を使用した。

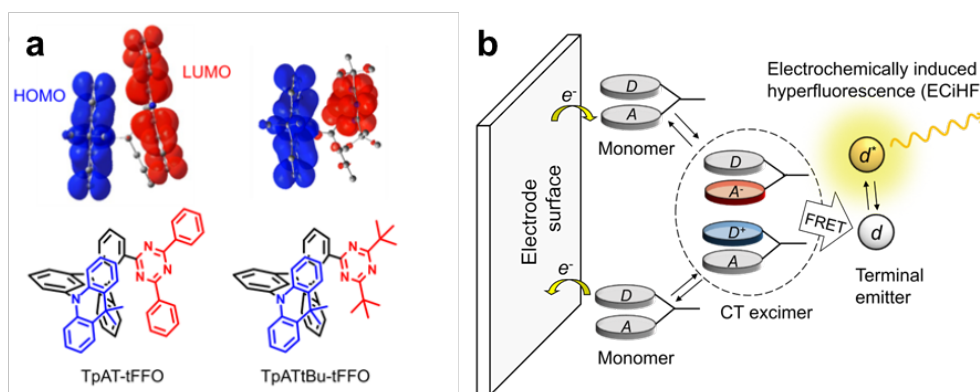


Fig. 1. **a** Molecular structures of TpAT-tFFO and TpATtBu-tFFO. **b** Schematic of ECiHF with formation of CT excimers and energy transfer to the terminal emitter.

発表論文(謝辞あり)

C.-K. Moon, Y. Yasuda, Y. Kusakabe, A. Popczyk, S. Fukushima, J. F. Butscher, N. Pathak, J. Schlecht, K. Ishihara, O. Dumele, H. Kaji, and M. C. Gather, *Nat. Commun.* 2026 (accepted).