

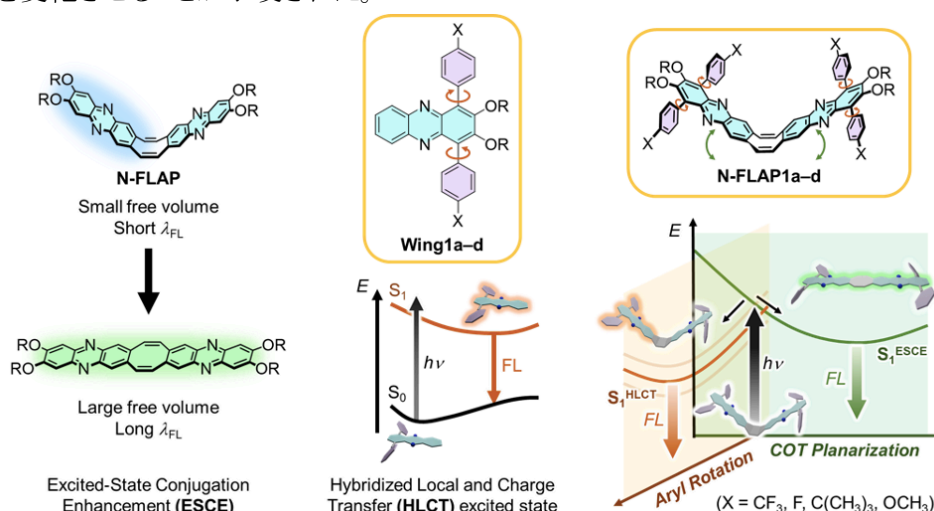
コンフォメーション変化により二重発光特性を示す化合物の網羅探索  
Exhaustive search for compounds that exhibit dual luminescence properties  
by conformation change

京都大学 理学研究科 化学専攻 集合有機分子機能研究室 齊藤 尚平

# 研究成果概要

当研究室では、コンフォメーション変化により二重発光特性を示す化合物を開発している。しかし、二重発光性の発現制御や、その発光波長の制御、励起状態における活性化障壁の制御などは未だに困難である。そこで Gaussian を用いた量子化学計算により、狙いの二重発光特性を示す化合物の網羅探索を行った。

題材としたのは既報分子を修飾した **Wing1a-d** および **N-FLAP1a-d** である。図中の置換基 X の電子的特性を変えることで、フェナジン骨格と 4-置換フェニル基の間のねじれに起因する Hybridized Local and Charge Transfer (HLCT) 励起状態のエネルギーレベルを変化させた。その結果、**Wing1a-d** および **N-FLAP1a-d** はその置換基と溶媒によって励起状態からの主な失活過程を変化させることが示唆された。



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、様々な置換基 X をもつ **Wing1a-d** および **N-FLAP1a-d** の光学特性や失活過程を計算化学の観点から調べた。Gaussian を用いた DFT 計算により、実験から得られた吸収スペクトルおよび蛍光スペクトルの帰属を行った。その結果、置換基 X が電子豊富になるほど蛍光スペクトルが赤方偏移することが理論的にも示された。また ORCA を用いた Matrix Element of the Spin-Orbit Coupling (SOCME) の見積もりによって、置換基 X が電子不足になるほど一重項励起状態から三重項励起状態への項間交差が速くなることが示唆された。

現在、超高速分光の研究者との共同研究により励起状態からの失活経路を実験からも詳しく調べており、本システムの利用成果を含む論文を執筆中である。