

# ネマチック液晶中での蛍光異方性と色素分子形状の関係

(産総研) ○大園拓哉\* 谷田部哲夫 (名大)ワン チェンガン・深澤愛子・山口茂弘

## 【はじめに】

液晶や生体膜などの流動性異方媒体中で、異物がどのような状態をとっているのかは興味深い問題である。生体膜ではそれらの異方的な振る舞いが様々な機能に影響するし、液晶では添加分子が液晶場で配向する。キラルドーパント等では液晶の状態も変えてしまう場合もあるが、ここでは異方性場は変わらない程度の分子の添加を想定し、液晶中に添加された分子の状況を議論したい。添加分子は異方性場で平均的に異方的な配座を取るため、その分子が蛍光性の場合には蛍光も一般に異方性（偏光性）を持つ。この性質が注目され、古くから表示素子応用（ゲストホストモードと呼ばれる表示素子様式）に向け、吸収異方性と共に研究されていた。表示素子応用の他に、この蛍光異方性は非一様な配向状態（配向欠陥構造等）の可視化等に利用できるため（偏光顕微鏡では得られない情報が共焦点顕微鏡等で得られる）、生体観察を含めた基礎研究では重要な性質である。今回、名古屋大学のチームで新しく合成された一連のホスホールオキサイド系蛍光色素（図上が一例）がネマチック液晶中で置換基に応じた正から負までに及ぶ蛍光異方性（正の異方性は、蛍光がネマチックダイレクタと平行、負のそれはそれと垂直）を示すことが分かり、その実験結果と分子形状の解釈を試みた(1)ので報告する。

## 【結果と考察】

実験で得られた蛍光異方性の解釈のため、分子軌道計算により分子形状と蛍光の遷移双極子モーメント（TDM）ベクトルを求め（図）、それらを元に、ネマチック平均場中での分子中のTDMの2次のスカラオーダーパラメータを求めた。その結果、一連の分子において実験と理論の傾向の一致が得られ、まずは用いた理論での定性的な解釈が可能になった。より具体的には、分子形状が棒状では“なくなる”に従って正の異方性が少なくなる傾向と、分子のどちらかという長軸に対して直交してTDMを持つと負の異方性を示しやすくなる、ということを確認できた。言い方を変えると、今回の $\pi$ 共役系の軸方向に非平行な方向に置換基が突き出てくると、負の異方性が出やすくなった。蛍光分子の形状が変化する（内部自由度がある）場合には、それも考慮した平均配座を考慮する必要はあるものの、得られた知見と用いた解析方法は、蛍光分子の異方性の予想やデザインに一般的に使えるだけでなく、異方性媒体中に添加された一般の分子（等）の形状からその異方的な状態の評価にも利用できるため、その活用が期待される。

## 【参考文献】

(1) T. Ohzono, T. Yatabe, C. Wang, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, *Commun. Chem.* **1**, 52, 2018.

