

無色透明な近赤外応答型有機半導体材料の創製

産業科学研究所 ソフトナノマテリアル研究分野

助教 横山 創一

https://researchmap.jp/Soichi_Yokoyama

教授 家 裕隆

<https://researchmap.jp/read0105668>

研究の概要

近赤外光選択的な吸収を示す無色透明な有機分子の開発は、近赤外光のイメージングや無色透明な太陽電池材料といったデバイス材料応用が期待される。一方、無色透明な分子の開発例は限られており、分子設計指針も明確ではないという課題がある。本研究では、分子軌道の対称性に着目した分子設計指針を提案することで、近赤外光選択的な吸収特性を示す無色透明な有機分子を開発に取り組んだ。電子遷移の選択則で知られる Laporte 則に基づいて、近赤外領域の電子遷移のみを許容になるビルディングユニットを選定し、これを組み込んだ新規分子 FNTz-Py を開発した。FNTz-Py は近赤外領域に吸収を示す無色透明な溶液・薄膜になり、近赤外光に対しても選択的な応答を示すデバイス応用が可能になることを見出した。

を活用することで、近赤外光を電気エネルギーに変換可能な無色透明有機太陽電池の開発も可能になると期待している。

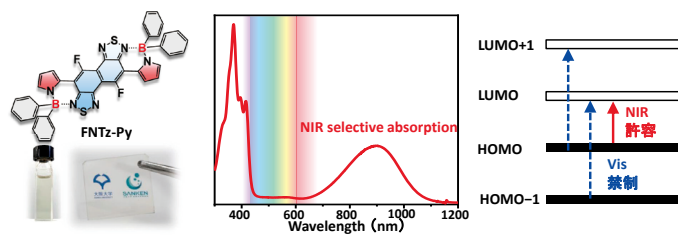


図1

研究の背景と結果

近赤外光は太陽光に含まれている視認できない光であり、この光に対して応答を示す半導体材料は、近赤外光のイメージングやセンシング、無色透明な太陽電池材料といった、様々な材料応用が期待されている。一方で、このような「近赤外光選択的な吸収特性」を持った有機半導体材料開発の例は限られており、分子設計の指針が明確に提唱されていないことが課題である。そこで、本研究では近赤外光選択的な吸収特性を示す分子設計指針の創出ならびに分子材料開発に取り組んだ。

近赤外光選択的に吸収を示す材料設計には、①近赤外光領域に吸収を持つように分子のバンドギャップを十分狭めること、②近赤外領域の電子遷移が許容である一方で、可視光領域の電子遷移をすべて禁制にする必要がある。例えば、L2B2分子はドナー (D) とアクセプター (A) を組み合わせた D-A 型構造にホウ素架橋を組み込むことで、近赤外領域に吸収を示すが、可視光領域の電子遷移が許容になってしまうため、可視光吸収を示し青色に呈色する (T. Nakamura, S. Furukawa, E. Nakamura, *Chem. Asian. J.* 2016, 11, 2016-2020)。電子遷移の選択則は、電子遷移に伴った軌道対称性が維持されるか反転するかによって判断することができる (Laporte 則)。この法則に基づいて近赤外領域の電子遷移のみを許容にするよう軌道配置を制御すればよい。実際に設計した FNTz-Py は、可視光から近赤外光にかけていくつかの電子遷移が存在するが、近赤外光領域の電子遷移は軌道対称性が反転するため許容となり、可視光領域の電子遷移は軌道対称性が維持されるため禁制となる。結果的に、FNTz-Py は L2B2 と非常に似た構造でありながら、その吸収特性は大きく異なり、可視光に吸収を持たず、近赤外光領域に吸収を持つ波長選択性を示すことを明らかにした。加えて、今回開発した FNTz-Py から構成されるデバイスは近赤外光に対しても選択的な応答を示すことを見出した。

研究の意義と将来展望

今回開発した近赤外光を選択的に吸収することが可能な有機半導体材料は、近赤外光センシングだけでなく、光学フィルタや熱遮蔽フィルムや太陽光エネルギー変換材料への応用も期待できる。特に、近赤外光は太陽光エネルギーの約3割程度占めているが、シリコン型太陽電池やペロブスカイト太陽電池ではほとんど活用されていない。そのため、今回提唱した「近赤外光選択型有機半導体材料の分子設計指針」

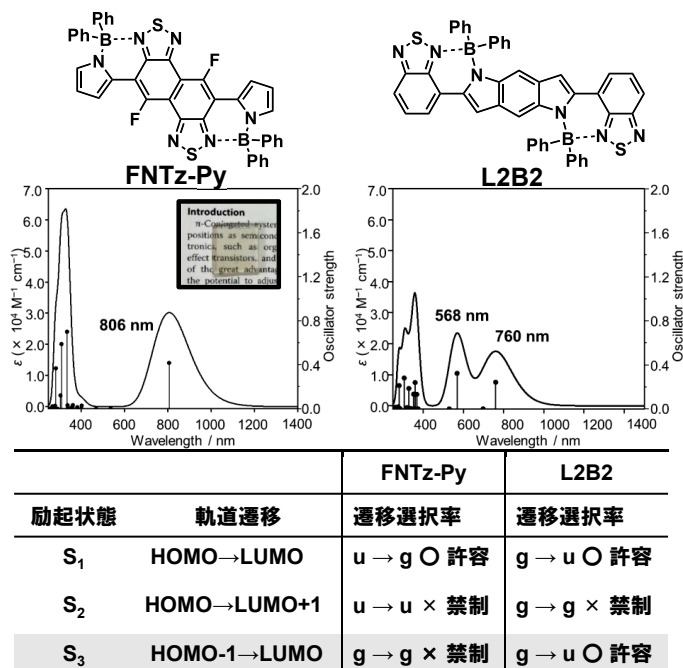


図2

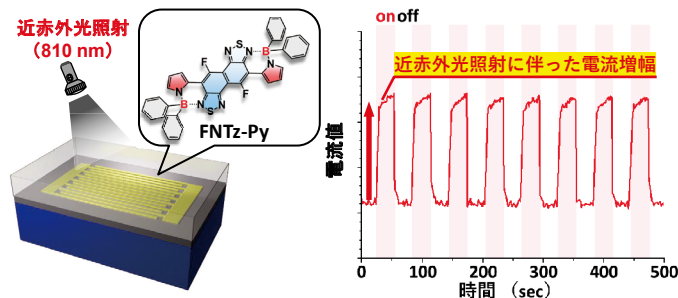


図3

特 許 PCT/JP2025/005511

論文 Yokoyama, Soichi; Ie, Yutaka. Fluorinated dihydropentalene-1,4-dione: a strong electron-accepting unit with organic semiconductor characteristics. *Chem. Eur. J.* 2023, 29, e202203873. doi: 10.1002/chem.202203873
Yokoyama, Soichi; Ie, Yutaka et al. Colorless near-infrared absorbing dyes based on B-N fused donor-acceptor-donor π -conjugated molecules for organic phototransistors. *Adv. Sci.* 2024, 11, 2405656. doi: 10.1002/advsc.202405656

参考URL <https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/omm/>

キーワード 近赤外色素、有機半導体、有機機能性材料