京都工芸繊維大学
KYOTO INSTITUTE OF TECHNOLOGY

令和 8 年 11 月 5 日
国立大学法人 京都工芸繊維大学

小さな分子でも近赤外光まで吸収できる新しい有機色素を開発

1．発表者：

山田 重之（京都工芸繊維大学 分子化学系 教授）

2．発表のポイント：

◆反芳香族性（注 1）を示す骨格を利用し、近赤外光（注 2）まで吸収する有機色素を開発しました。ジクロロメタン溶液中で 696 nm に吸収極大を示し、吸収は 900 nm を超える波長域まで広がりました。

◆従来のように分子内の π 共役系（注 3）を長く伸ばすことに頼らず、環状骨格の形成と電子供与性基の導入によって、吸収する光を長波長側へ移す設計方法を示しました。

◆近赤外光を利用する機能性材料の分子設計に新たな指針を提示しました。塩基の添加で光吸収が大きく変化する性質も確認し、化学環境に応答する材料への展開が期待されます。

3．発表概要：

京都工芸繊維大学の分子化学系 山田重之 教授らの研究グループは、従来とは異なる分子設計によって、目に見えない近赤外光まで吸収する新しい色素の開発に成功しました。

近赤外光を吸収する有機色素は、太陽エネルギーの有効利用など、さまざまな分野への応用が期待されています。しかし、従来の色素では吸収する光の波長を長くするために、高価な貴金属を含ませたものや、分子内の π 共役系を拡張する手法が広く用いられており、分子構造や合成工程が複雑になることが課題の一つでした。

本研究グループでは、反芳香族性と呼ばれる特徴的な電子性質を示す「フルオレニルカチオン骨格」（注 4）と、電子を与えやすい「ジュロリジン骨格」（注 5）を組み合わせることで、π 共役系を大きく拡張することなく、近赤外域まで光を吸収する有機色素を開発しました。さらに、開発した色素に電子を与えるはたらきの強い置換基を導入した色素では 696 nm に吸収極大を示し、900 nm を超える近赤外域まで吸収が広がることを確認しました。実験と理論計算の両面から分子構造と電子状態の関係を明らかにし、近赤外光を吸収する有機色素の新たな分子設計指針を示しました。

本研究成果は、π 共役系を大幅に拡張することなく近赤外光を吸収する有機色素を設計するための新たな指針となり、今後、近赤外光を利用する機能性材料や、周囲の環境に応じて光吸収が変化する材料の開発につながることが期待されます。本研究の論文は、2026 年 10 月 30 日付で国際学術誌

『ChemPhotoChem』にオンライン掲載されました。

４．発表内容：

研究の背景

近赤外光は、目に見える赤い光よりも波長が長く、人の目には見えない光です。光を使って化学反応を進める光触媒、太陽エネルギーの変換、食品や医薬品の光による変質を抑える材料など、さまざまな分野で活用が期待されています。こうした用途では、目的の波長の光を吸収する色素が重要です。一方、既存の近赤外吸収色素には貴金属を含み、コストや環境負荷が課題となるものがあります。金属を含まない有機色素でも、分子の中で電子が広がる構造（π 共役系）を長く伸ばして吸収波長を長くすると、合成や精製の工程が増える場合があります。本研究グループは以前、炭素–炭素三重結合を導入して近赤外光を吸収する色素を開発しましたが、光・塩基・熱に対する安定性との両立が課題でした。そこで今回は、π 共役系を単に伸ばすのではなく、分子の電子構造を変える方法に着目しました。

研究内容

本研究グループが着目したのは、反芳香族性という電子の性質です。反芳香族性を示す分子は、電子のエネルギー状態に特徴があり、分子を大幅に大きくせずに吸収波長を長くできる可能性があります。そこで、反芳香族性を示す環状の「フルオレニルカチオン骨格」と、電子を与えるはたらきが強い「ジュロリジン骨格」を組み合わせた色素を設計し、2 種類を合成しました。対照化合物である従来型色素は 540 nm に主な吸収極大を示すのに対し、フルオレニルカチオン骨格を形成した色素（**1a-ClO_4**）では 602 nm となりました。さらに、フルオレニルカチオン骨格上に、電子を与えやすいジメチルアミノ基を導入した色素（**1b-ClO_4**）では 696 nm となり、吸収が 900 nm を超える波長域まで広がりました（図 1）。696 nm は赤い可視光の領域ですが、吸収は目に見えない近赤外光にまで及んでいます。これは、分子内の π 共役系を長く伸ばさずに長波長吸収を実現できることを示しています。

量子化学計算と分子構造の解析から、フルオレニルカチオン骨格の形成には、分子がより平面に近づく変化と、反芳香族性の増大が伴うことが示されました。同時に、電子が占める軌道と空いている軌道の間のエネルギー差（HOMO–LUMO ギャップ）が小さくなりました。一方、ジメチルアミノ基を導入して吸収波長がさらに長くなった効果は、主として電子供与性が強まったことによると考えられます。このように、環状骨格の形成と置換基の効果を組み合わせて光の吸収を制御できることが分かりました。

開発した色素 **1b-ClO_4** の主な吸収極大は、検討した溶媒中で 688〜700 nm の範囲にあり、溶媒の種類による波長の変化は比較的小さいものでした。また、色素と対になる陰イオン（対アニオン）を変えても、吸収極大の位置はほぼ変化しませんでした。

光に対する安定性を調べたところ、色素 **1a-ClO_4** と **1b-ClO_4** では、本研究で設定した条件で 16 時間 LED 光を照射しても、主な吸収帯に大きな変化は見られませんでした。また、**1b-ClO_4** は酸を加えても吸収の変化が小さい一方、塩基を加えると主な吸収が大きく減少しました。706 nm の光を当てると 916 nm 付近に近赤外発光も観測されましたが、その強さは非常に弱く、発光材料としての実用性を示すものではありません。

今後の展開

本研究は、π 共役系を長く伸ばす方法に頼らず、分子の環状骨格や電子供与性を設計することで、近赤外域まで光を吸収する有機色素を得られることを示しました。現時点で材料としての実用性を確立したものではありませんが、近赤外光を利用する機能性材料の開発に新しい選択肢を与える成果です。今後は、異なる光照射条件や使用環境での安定性、塩基を加えたときに吸収が変化する仕組みを詳しく調べる必要があります。また、材料へ組み込んだ場合の性能も評価し、近赤外光の吸収を利用する材料や、周囲の化学環境に応答して吸収が変わる材料への展開を目指します。

５．発表雑誌：

雑誌名：ChemPhotoChem（Wiley-VCH 刊行）

論文タイトル：Compact Near-Infrared-Absorbing Triarylmethane Dyes Based on Antiaromatic Fluorenyl Cations

著者：Hayato Kitaoka, Natsuki Tamano, Kazuki Kobayashi, Masato Morita, Motohiro Yasui, Tsutomu Konno, Shigeyuki Yamada（責任著者）

DOI 番号：10.1002/cptc.70332

アブストラクト URL：https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cptc.70332

６．用語解説：

注 1）反芳香族性

環状に並んだ電子（π 電子）の数や結び付き方に関係する電子的性質で、一般的な芳香族性とは異なる電子構造を示します。本研究では、フルオレニルカチオン骨格に見られるこの性質を、色素の設計に活用しました。

注 2）近赤外光

人の目に見える赤色光よりも波長が長い光。一般に目で見ることはできません。本研究で開発した色素は、吸収が 900 nm を超える近赤外域まで広がっています。

注 3）π 共役系

二重結合と単結合が交互につながり、電子が分子内の複数の原子に広がっている構造。一般に、このつながりを長くすると吸収する光の波長も長くなる傾向がありますが、分子の合成が複雑になる場合があります。

注 4）フルオレニルカチオン

中央に五員環をもつフルオレン骨格の 9 位に位置する炭素原子に正電荷をもたせた構造。本研究では、この骨格をつくることに伴う反芳香族性や分子の平面性の変化に着目しました。

注 5）ジュロリジン

窒素原子を含み窒素原子上のアルキル基が近傍のベンゼン環と連結した構造をもつ有機基。窒素原子の周囲で結合の回転が制限されており、電子を与えるはたらきが強いことから、本研究では電子を供給する部分として利用しました。

7．添付資料：

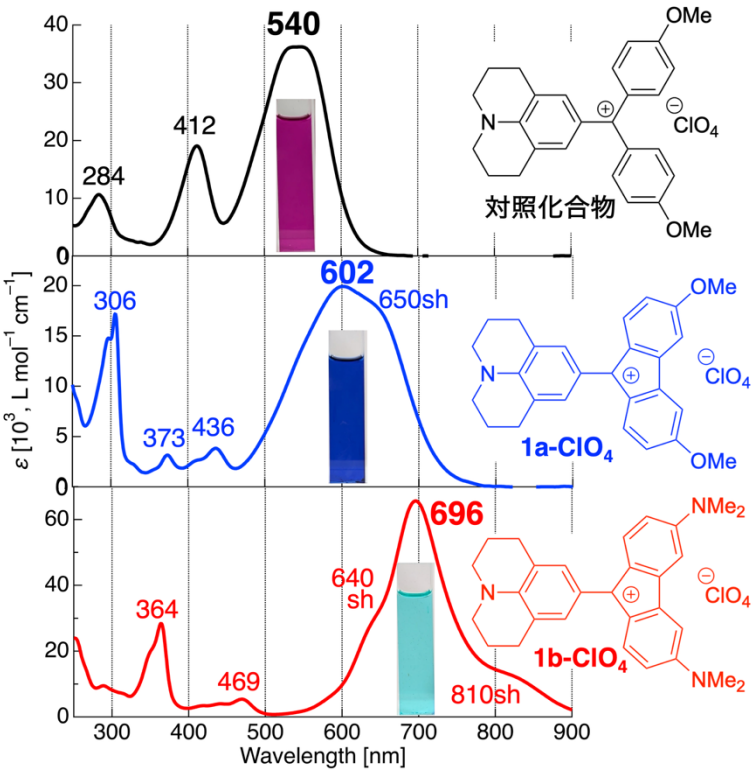


図１　対照化合物の色素（黒）と今回開発した色素（青：**1a-ClO_4**，赤：**1b-ClO_4**）の紫外–可視吸収スペクトル。横軸は光の波長、縦軸は吸収の強さ（モル吸光係数）を示します。赤い線の色素は 696 nm に吸収極大をもち、吸収が 900 nm を超える近赤外域まで広がります。いずれもジクロロメタン溶液中で測定しました。