

訪問日 2014年9月2日

東京工業大学 大学院理工学研究科 有機・高分子物質専攻 平田 修造 助教

研究題名：低パワーの非コヒーレント光による高効率エネルギーアップコンバージョン

#### 東京工業大学・平田修造先生を訪ねて

当日は今回の研究と関連する多数の論文をご用意の上、プロジェクトで丁寧に説明していただきました。

一般的には吸収材料に例えば緑色の光を当てると、より波長の長い黄色や赤色の発光が生じますが、アップコンバージョンでは逆の現象が起こり、緑色の光を入れると青く光ります。長波長の光子2ヶから短波長の光子1ヶが作られますので、光子の数は半分になりますが、一つ一つの光子のエネルギーは倍になります。基本的には多段階の吸収によりエネルギーレベルを上げています。このアップコンバージョン材料を太陽電池の前面に設置すれば、発電に寄与しない近赤外光を可視光に変換でき、どんな太陽電池においても効率の改善に寄与できる汎用性をもちます。別の応用は癌の治療法として光線力学療法への応用で、体内透過性のよい700nm以上の光を体内でアップコンバージョンし活性酸素をつくるというものです。

アップコンバージョン材料の課題は、強いレーザーを照射するときは起こりますが、太陽光のような強度がせいぜい10 mW/cm<sup>2</sup>のオーダーの光では、従来の材料ではほぼ起こりません。先生は10 mW/cm<sup>2</sup>程度の光でも効率よくアップコンバージョンが起こる材料を開発しようとしています。

アップコンバージョンのメカニズムは、溶液中に光を吸収できるドナー (D) と光を吸収できないアクセプター (A) があると、Dは光により励起し一重項励起子になり、次にDの三重項励起子に更にはAの三重項励起子 (T<sub>1</sub>) に、エネルギーが移動します。このT<sub>1</sub>が蓄積され、隣接する2分子のT<sub>1</sub>が衝突することで三重項-三重項消滅を経て発光が生じます。T<sub>1</sub>の寿命を長くすれば、弱い光でもT<sub>1</sub>が蓄積され、アップコンバージョンが可能になります。通常T<sub>1</sub>状態にいる時間は1ミリ秒程度(有機ELの色素も同程度)と短いですが、先生は天然物であるヒドロキシステロイドを宿主材料に使うことで、室温大気下で数秒レベルの長い励起三重項状態を得ることができました。これは水素結合により強固なネットワークが形成されることで、対酸素バリア性の向上とゲスト分子の振動を抑制したことによるそうです。各種の有機物をステロイドに溶かすことで、T<sub>1</sub>の寿命を千倍長くでき、弱い光でもT<sub>1</sub>を蓄積することが可能になります。(記号は下図を参照ください)

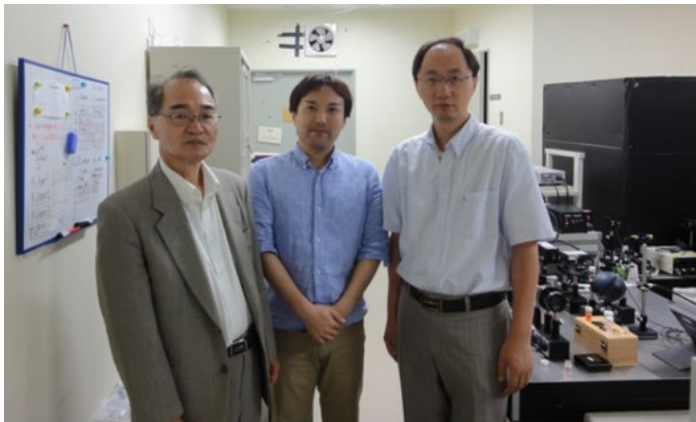
ここまでの知見をもとに、次の機能であるアップコンバージョンが助成テーマです。AのT<sub>1</sub>はAによる光吸収では作り出せません。そこでDのT<sub>1</sub>を経由してAのT<sub>1</sub>を作り出します。このためにはDのS<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギーレベルとそのギャップが重要です。このエネルギーギャップを小さくするには、HOMOとLUMOが分離された状態にすればよいことが計算科学を用いて推定され、既に有機EL材料などで実証されているようです。計算によって推測して実際に有機合成します。一般的にはHOMOとLUMOは重なりますが、分子のねじれを利用し重ならないようにし、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギー差を小さくしてAのT<sub>1</sub>を溜めるとのことです。

当日は実際に合成したDの吸収特性や蛍光特性、Aの三重項励起子からの1秒以上の寿命を有するりん光特性のデータを説明いただきました。また実験室にて、DとAの溶液中でのアップコンバージョン発光、緑色光が青色光に変換される様子、秒レベルでの遅延発光の様子を見せていただきました。研究ステップとしてはまず機能を優先し、弱い光でもアップコンバージョンできること、その後、近赤外域での吸収波長での実現、そして効率を考えていきたいとのこと。先生の研究姿勢は、デバイスを念頭にデ

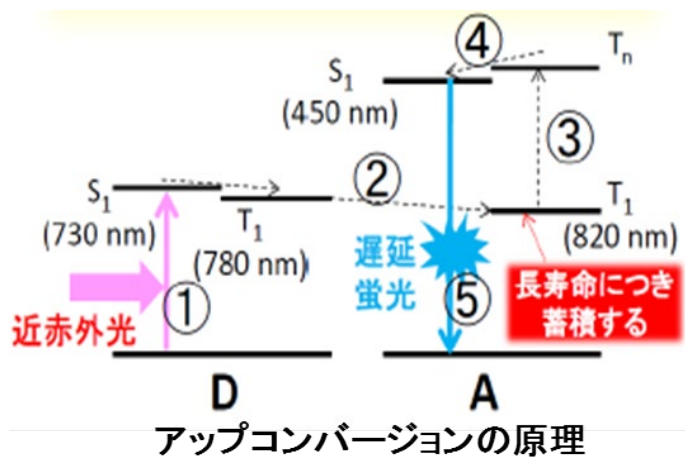
バイスの基本コンセプトに対応する汎用性のある材料設計です。

計算科学の駆使とその限界、分子の構造と、光の吸収波長、分子間のエネルギーの移動、アップコンバージョンの関係など分子設計の醍醐味を窺えたような訪問でした。

(2014年9月2日、技術参与・飯塚)



光学計測装置をバックに  
; 中央が平田先生



### ステロイドホストゲストシステム

