

先端国際共同研究推進事業

2024 年度採択

次世代のための ASPIRE

マテリアル分野

2024 年度 年次報告書（公開版）

研究課題名	熱活性化遅延蛍光を活用したサステイナブルな次世代バイオイメージング材料の創製
日本側研究代表者	武田 洋平 大阪大学 大学院工学研究科 准教授
相手側研究代表者	・ Zachary Hudson, Associate Professor, The University of British Columbia ・ Marc Etherington, Assistant Professor, Northumbria University ・ Piotr de Silva, Professor, Technical University of Denmark
研究期間	2024 年 12 月 1 日～2028 年 3 月 31 日

1. 研究成果の概要

① 研究構想にかかる成果

<実施したこと>

本研究課題では、TADF（熱活性化遅延蛍光）特性を持つ新規バイオイメージング材料の創製を目的として、基盤分子設計から基礎解析までの体系的なアプローチを推進した。2024 年度はその初年度として、電子アクセプターとしてジベンゾフェナジン誘導体を採用し、さまざまな電子ドナーと組み合わせたドナー・アクセプター・ドナー（D-A-D）型骨格を中心に、スルースペース電荷移動型分子群も含めた幅広い構造探索を行った。分子設計・探索には、時間依存密度汎関数法による計算化学的スクリーニングを活用し、励起一重項状態エネルギー（ S_1 ）と一重項-三重項エネルギー差（ ΔE_{ST} ）を指標として、近赤外発光特性を持つ可能性のある分子を網羅的に選抜した。さらに、Proof-of-Concept（POC）材料としての応用を見据え、官能基導入が可能な分子構造設計と合成にも取り組んだ。これにより、単なる分子スクリーニングにとどまらず、将来的な高分子化やナノ粒子形成を意識した素材開発へと発展させる基盤整備を進めた。また、分子動力学（MD）シミュレーションを用いて、TADF 分子を導入した高分子が水中環境下でどのように凝集し、Pdof 構造を形成するかについて理論的解析も開始し、次年度以降の材料設計指針策定に向けた準備を進めた。

<得られた成果>

in silico スクリーニングの結果、近赤外領域で高効率な TADF 発光が期待できる分子群を複数特定することに成功した。これらの中から、特に ΔE_{ST} が小さく、近赤外領域での発光が期待できる構造を持つ候補分子を絞り込み、次年度以降の詳細合成・評価に向けた基盤を構築した。Proof-of-Concept（PoC）材料としては、官能基化が可能な D- π -A 型分子の設計・合成に成功し、高分子モノマーとしての展開可能性を実証した。また、MD シミュレーションを通じて、導入された TADF 分子の種類や配置によって水環境下での凝集体形成過程に違いが生じることを示唆する結果を得た。これにより、TADF 特性とナノ構造制御の両立に向けた研究戦略を大きく前進させる成果を得た。

② 国際頭脳循環の促進にかかる成果

<実施したこと>

本課題では、国際共同研究の円滑な遂行と若手研究者の国際経験蓄積を重視し、人的交流と体制整備を並行して進めた。2024 年度、課題開始初頭に専用の Slack ワークスペースを開設し、国内外の研究者間で継続的な情報交換・議論が行える環境を整備した。これにより、日常的な研究ディスカッションに加え、渡航準備や現地生活に関する実務的な支援も可能となった。さらに、主要メンバーが海外連携機関を訪問し、現地研究者との対面ディスカッション、施設視察等を実施した。これらにより、研究連携の深化と信頼関係の構築に努めた。加えて、国際頭脳循環の円滑な運営を支援する体制を構築するため、国際業務経験を有する人材を JREC-IN（JST の運営する、イノベーション創出を担う研究人材のためのキャリア支援ポータルサイト）を通じて公募し、支援体制の強化を図った。

<得られた成果>

Slack ワークスペースを通じた情報交換により、単なる研究進捗報告にとどまらず、若手研究者間での自主的な交流・協働が活性化し、国際共同研究推進に資する人的ネットワーク形成が促進された。現地訪問では、実験技術、材料評価手法、施設活用計画に関する具体的な協議が進み、次年度以降の本格的な共同研究フェーズに向けた体制強化に貢献した。また、国際業務支援に精通したコーディネーターを採用できたことで、今後の渡航・招聘スケジュール管理、現地滞在サポート体制が大幅に向上し、頭脳循環活動の一層の加速が期待される。

2. 研究実施体制

研究テーマ	中心となる研究者氏名	所属機関・部署・役職名
研究テーマ1 TADF分子の開発および官能基化	武田 洋平	大阪大学・大学院工学研究科・准教授
	Zachary Hudson	The University of British Columbia・Associate Professor
	Marc Etherington	Northumbria University・Assistant Professor
研究テーマ2 水中でTADFを示すPdotの創製とバイオイメージングへの応用	武田 洋平	大阪大学・大学院工学研究科・准教授
	Zachary Hudson	The University of British Columbia・Associate Professor
	Marc Etherington	Northumbria University・Assistant professor
研究テーマ3 理論的アプローチに基づいたバイオイメージング材料の解析・設計	渡辺 豪	北里大学・未来工学部・教授
	Piotr de Silva	Technological University of Denmark・Professor

3. 代表的な業績（原著論文、プレスリリース、表彰など）

無し