

PRESS RELEASE (2025/07/30)

発光技術と医療をつなぐ次世代有機材料を開発

～生体に優しい近赤外レーザーで光る新素材が、有機 EL と医療応用の架け橋に～

ポイント

- ① 熱活性化遅延蛍光 (TADF, ※1) と 2 光子吸収 (※2) は分子設計の要件が正反対で、単一分子での両立は極めて困難とされていた
- ② 吸収と発光過程で異なる軌道特性をもつ分子構造を精密に設計することで、TADF と 2 光子吸収を単一分子で両立し、そのメカニズムを理論計算と実験の両面から解明
- ③ 医療用蛍光プローブや OLED などへの応用が期待され、ライフサイエンスとエレクトロニクスを橋渡しする新たな材料開発につながる

概要

九州大学大学院工学研究院の安達千波矢教授、千歳洋平助教、国立台北科技大学の林家弘教授らの研究グループは、目に見えない近赤外レーザーによって光る新しい有機分子を開発し、それを有機 EL (OLED) としても高効率に発光させることに成功しました。今回開発された分子は、「熱活性化遅延蛍光 (TADF)」と、近赤外レーザーによって効率的に励起される「2 光子吸収」という、通常は両立が難しい 2 つの光機能を単一分子内で実現した点で、非常に画期的です。これらの特性は従来、個別に研究されてきましたが、本研究では分子設計により両者を高度に両立させ、その発現メカニズムを理論計算と実験の両面から明らかにしました。両機能を同時に発現しつつ、応用展開まで示した例は世界的にもほとんど例がありません。

今回開発した分子は、700～900 nm の近赤外光を 2 光子で吸収し、明るい可視光発光を示します。また、有機 EL 材料として用いた場合でも、外部量子効率 13.5% という優れた性能を示しました。これにより、従来は用途ごとに個別に設計されていた材料を、1 つの分子で多機能的に活用できる可能性が拓かれ、材料設計の効率化やコスト削減にも大きく貢献すると期待されます。さらにこの材料は、金属を一切含まない純粋な有機分子で構成されており、細胞毒性が低く、生体適合性にも優れています。そのため、近年注目されている医療用蛍光プローブやがんの高精度診断といった応用にも適しており、今後の医療現場での活用が期待されます。

本研究成果は、国際学術誌「Advanced Materials」に 2025 年 7 月 30 日 (水) 午前 7 時 (日本時間) までに公開されました。



写真

左から、林家弘教授、千歳洋平助教、安達千波矢教授

研究者からひとこと：

TADF と 2 光子吸収という本来両立が難しい光機能を、1 つの分子で実現できたときの感動は忘れられません。吸収と発光で役割を切り替える“機能分離”の発想が鍵となりました。この成果が有機 EL の高性能化だけでなく、がん診断や生体イメージングといった医療技術や、最先端デバイスへの応用にも繋がることを期待しています。

(九州大学大学院工学研究院 千歳 洋平)

【研究の背景と経緯】

有機 EL (OLED) は、スマートフォンやテレビ、次世代ディスプレイなどに使われている高性能な発光デバイスです。その発光効率を飛躍的に向上させる技術として注目されているのが、「熱活性化遅延蛍光 (TADF)」です。TADF を利用して有機 EL の高効率化に世界で初めて成功したのは、2012 年の九州大学の安達千波矢教授らの研究グループによる報告でした (参考文献: Nature, 2012, 492, 234-238.)。

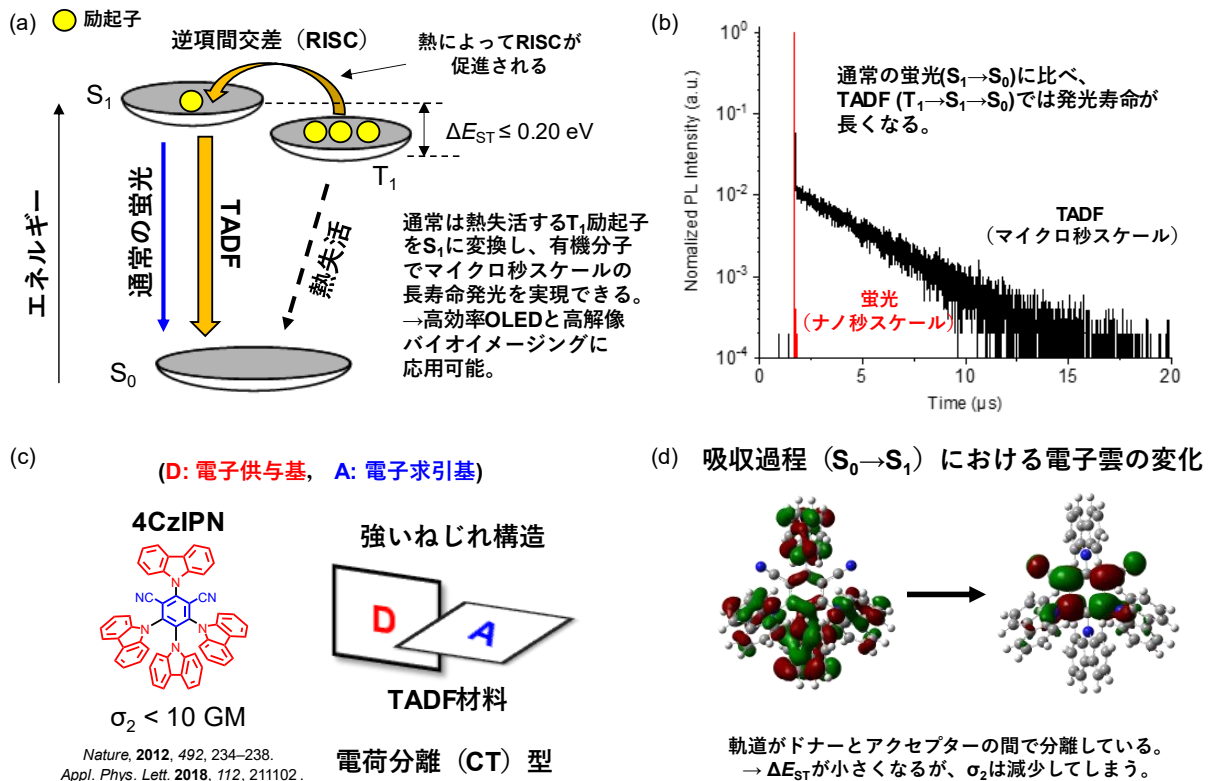


図 1. TADF 材料の特長について、(a)TADF 発現のメカニズム、(b)通常の蛍光と TADF の発光寿命の違い、(c)TADF 材料の分子設計、(d)TADF 材料における軌道の分離。

有機材料では、分子が励起されることで「一重項励起子 (S_1)」と「三重項励起子 (T_1)」というスピンの異なる 2 種類のエネルギー状態(※3)が生成されます (図 1a)。従来の有機 EL では、発光に利用できるのは 25% の S_1 のみでしたが、TADF では S_1 と T_1 のエネルギー差 (ΔE_{ST}) が小さいため (約 0.20 eV)、 T_1 を熱の力で S_1 に戻す「逆項間交差 (RISC)」(※4)を活用することで、すべての励起子を光に変換でき、理論上 100% の内部量子効率(※5)が実現可能となります。この成果以降、TADF は有機 EL の高効率化を支える革新的技術として、世界中で活発に研究が進められています。

TADF のもうひとつの特長は、マイクロ秒スケールの長寿命な発光を示すことです (図 1b)。この性質は、光の時間的な変化を捉えるバイオイメージングにも有用であり、特に近年では、近赤外レーザーを用いて生体深部を観察する「2 光子吸収」という技術と TADF を組み合わせることで、より高感度かつ深部に対応した新たなイメージング分子の開発が期待されています。

2 光子吸収とは、分子が近赤外的光子を 2 つ同時に吸収して励起される現象で、可視光よりも深く体内に届くという利点があります (図 2a)。がん診断や脳の深部観察といった医療・バイオ分野での応用が進む中、TADF と 2 光子吸収の両方を兼ね備えた材料は、理想的なバイオイメージングプローブとなり得ます。しかし、これら 2 つの特性は、分子設計における要求が本質的に正反対であるため、長らく同時に実現することは困難とされてきました。TADF では、発光を効率よく起こすために、電子を押し出す電子供与基 (ドナー) と、電子を引き寄せる電子求引基 (アクセプター) を用いて、電子が存在す

る領域（分子軌道）を分離して配置する必要があります（図 1c,d）。一方で、2 光子吸収では、ドナーとアクセプターの間で電子が重なり合うような軌道配置が求められます（図 2b,c）。

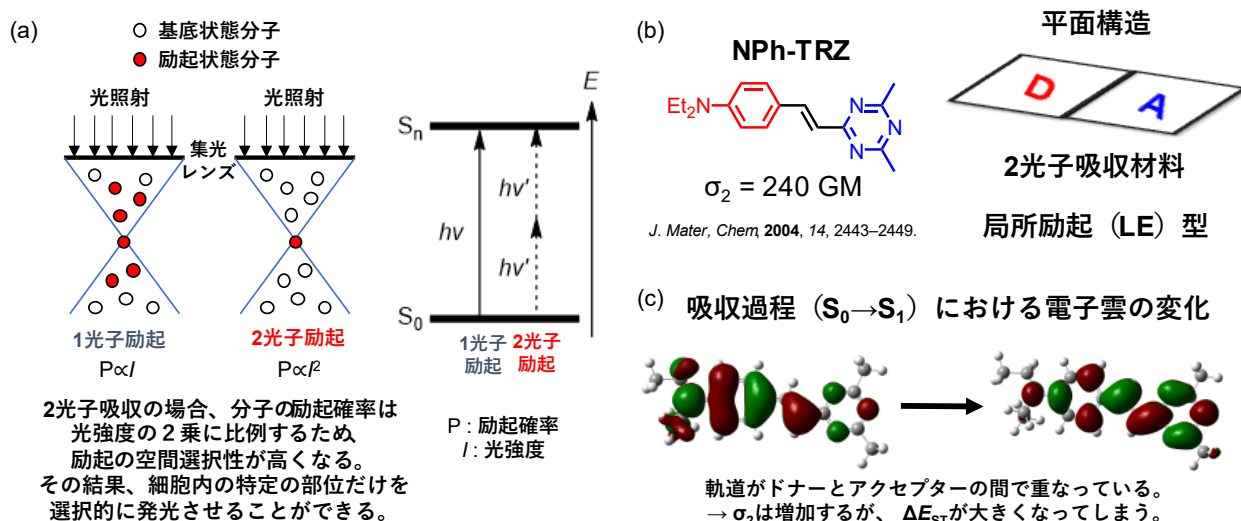


図 2. 2 光子吸収の特長について、(a) 1 光子吸収と 2 光子吸収の違い、(b) 2 光子吸収材料の分子設計、(c) 2 光子吸収材料における軌道の重なり。

分子軌道とは、電子が存在する“雲”のようなものであり、この雲がドナー部位とアクセプター部位の間でよく重なっていると、電子がスムーズに動きやすくなり、2 光子吸収の効率を示す「2 光子吸収断面積 σ_2 (単位: GM)」(※6)が大きくなります。一方で TADF では、この電子の雲を分離しておくことで ΔE_{ST} が小さくなり、熱を利用したエネルギー再利用 (RISC) が促進されますが、 σ_2 は小さくなります。つまり、「分離」が必要な TADF と、「重なり」が必要な 2 光子吸収は、電子配置の観点で相反する設計要件を持っており、1 つの分子で両立させることは極めて難しいとされてきたのです。

こうした課題に対し、千歳洋平助教らの研究グループは、2 光子励起で世界最高レベルの輝度を示す TADF 分子の開発や、2 光子応答性 TADF 材料を世界で初めて OLED に応用するなど、先駆的な成果を数多く挙げてきました（参考文献：Angew. Chem. Int. Ed., 2025, 64, e202420417.; Angew. Chem. Int. Ed., 2025, e202509348.）。

今回の研究では、これらの知見をもとに、TADF と 2 光子吸収の両立がなぜ難しいのかを、電子状態レベルから理論と実験の両面で解明しました。そしてそのうえで、両機能を高度に兼ね備える新たな発光分子の開発に成功しました。

【研究の内容と成果】

本研究では、電子受容性に優れた「トリアジン (TRZ)」骨格に着目し、これに電子供与性の「カルバゾール (Cz)」基を組み合わせた新規ドナーアクセプター分子

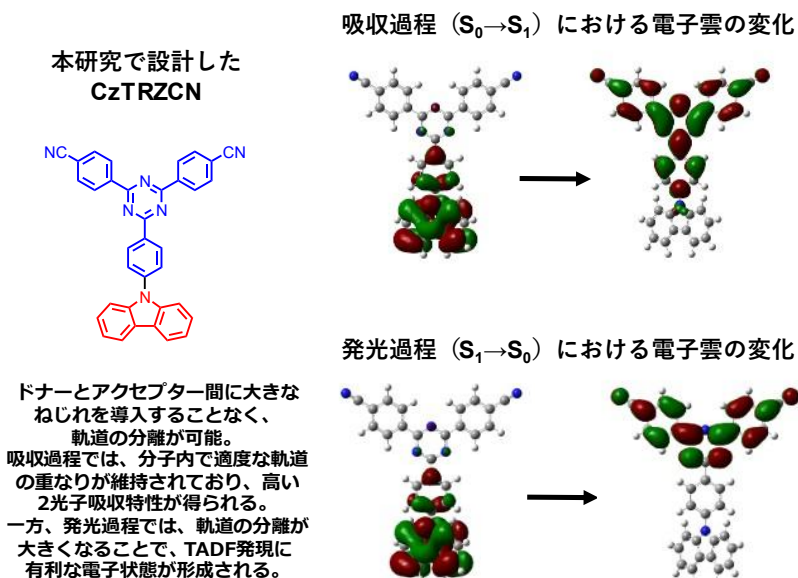


図 3. 本研究における分子設計コンセプトと、吸収および発光過程における電子雲分布の変化（量子化学計算による予測）。

(CzTRZCN) を設計・合成しました (図 3)。特に、トリアジン部位に電子求引性の高いシアノ (CN) 基を精密に導入することで、分子内の電子分布や軌道の性質を巧みに制御することに成功しました。合成した CzTRZCN は、溶液中および薄膜中のいずれにおいても TADF を示し (図 4)、薄膜中では最大 87% という高い発光量子収率 (※7) を達成するなど、優れた発光性能を示しました。

一般に、ドナーとアクセプターを結合すると、電子がアクセプター側に偏ることで軌道の重なりが失われ、2 光子吸収にとって不利になる傾向があります。しかし、CzTRZCN では、光を吸収する瞬間 (基底状態 S_0 から励起状態 S_1 への遷移) において、分子内の軌道の重なりがある程度維持されており、効率的な 2 光子吸収が可能となっています (図 3 右上)。

一方で、光励起後の発光過程 (S_1 から S_0 への遷移) では、構造緩和 (※8) により軌道の分離が大きくなり、TADF が発現しやすい電子状態へと変化します (図 3 右下)。すなわち、CzTRZCN は光の吸収時と発光時とで異なる役割を担う「機能分離」を単一分子内で実現しており、場面に応じて最適な軌道配置へと動的に切り替わる“分子内スイッチ”として機能する点が大きな特徴です。

さらに、量子化学計算によって励起状態の電子分布や遷移双極子モーメント (※9) の変化を詳細に解析した結果、本分子は「吸収時には適度な局在励起 (LE, ※10) 成分を保持し、発光時には電荷移動 (CT) 成分 (※11) を強く示す」ことが明らかとなり、上述の機能分離が理論的にも裏付けられました (図 5)。

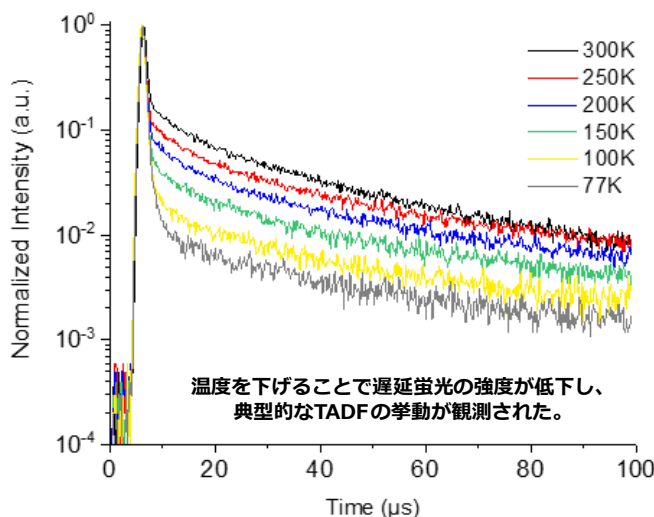


図 4. CzTRZCN を mCP ホスト中に 5wt% ドープした薄膜における発光減衰。

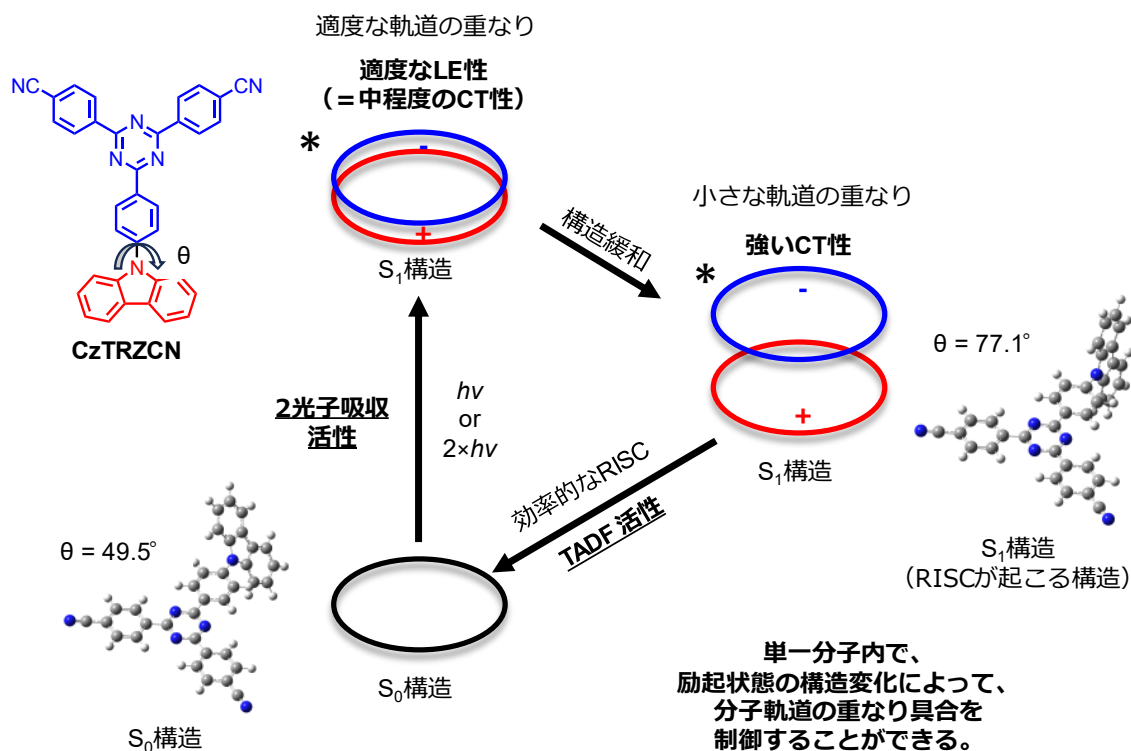


図 5. 本研究で提唱する、2 光子吸収と TADF を両立させるための分子内メカニズムの模式図。

また、類似構造を持つ従来の TADF 材料である PXZ-TRZ と比較したところ、PXZ-TRZ はドナーとアクセプター間に大きなねじれ角を有しており、そのため遷移双極子モーメントが著しく小さく、結果として 2 光子吸収断面積も大幅に低下していることが確認されました。一方、CzTRZCN は遷移双極子モーメントを高く保っており、その結果、2 光子吸収断面積として 200 GM という大きな値を示しました (図 6)。

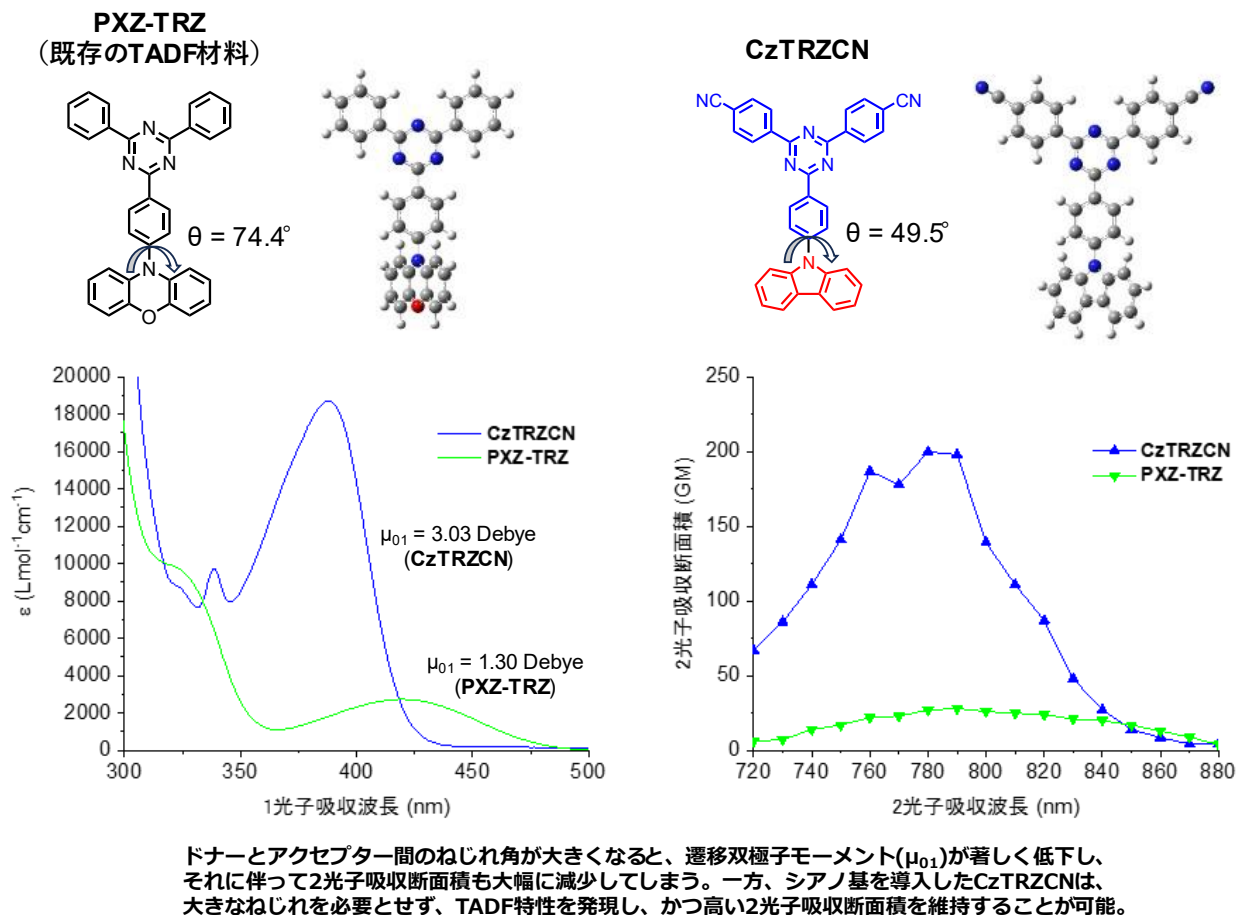


図 6. PXZ-TRZ および CzTRZCN の 1 光子吸収スペクトル (左) および 2 光子吸収スペクトル (右)。 θ はドナー部位とアクセプター部位の間のねじれ角を表す。

これらの結果から、電子求引性の高いトリアジン構造を活用することで、大きなねじれ構造を導入することなく、TADF と 2 光子吸収の両特性を両立させる分子設計が可能であることを実証しました。さらに、CzTRZCN を用いた近赤外 2 光子励起実験では、700～900 nm 付近の近赤外レーザーによって本分子が 2 光子吸収を起こし、明るい発光を示すことを確認しました (図 7a)。また、この分子を有機 EL 素子に応用したところ、13.5% という高い外部量子効率 (EQE) (※12) を達成し、従来の蛍光材料を基盤とした OLED の EQE を上回る結果が得られました (図 7b)。

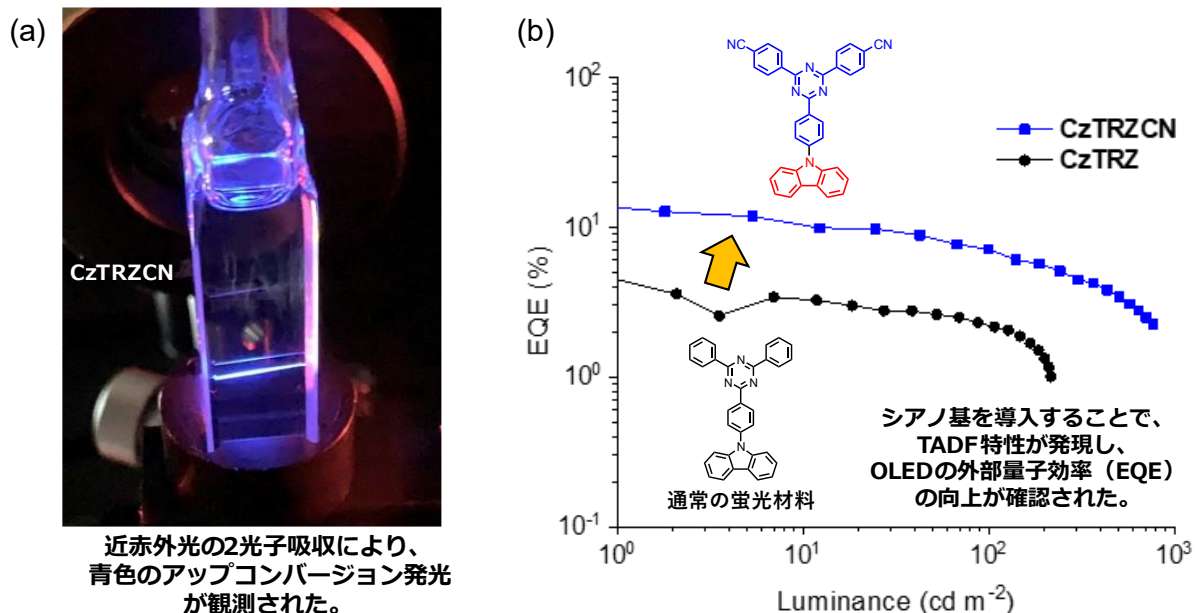


図 7. (a) CzTRZCN の近赤外 2 光子励起による青色アップコンバージョン発光の様子。
(b) CzTRZCN と既存の蛍光材料 CzTRZ を用いた OLED における外部量子効率 (EQE) の比較。

これらの成果は、今後の多機能性材料の分子設計に新たな視点を与えるものであり、応用物理や材料化学の分野において大きなインパクトを持つと考えられます。

【今後の展開】

本研究で開発した分子は、近赤外レーザーで効率的に励起される 2 光子応答性を有し、かつ金属を含まない完全有機材料であることから、今後の医療応用、特に「時間分解顕微鏡 (※13)」を用いた高精度なバイオイメーキングへの展開が期待されます。従来の蛍光プローブでは、自家蛍光などの背景ノイズが問題となっていました。本分子は長寿命の遅延蛍光を利用することで、そうしたノイズの影響を抑え、がんや神経疾患などの病変を明瞭に可視化できる可能性があります。これにより、より高感度な生体診断への応用が期待されます。

さらに、本研究で確立した「吸収と発光において異なる軌道特性を両立させる」という分子設計戦略は、TADF や 2 光子吸収にとどまらず、他の多機能性材料の開発にも広く応用できると考えられます。今後は、本設計指針をもとに、より高効率・長寿命・高安定性を兼ね備えた次世代の光機能材料や、先端的な発光・センシングデバイスの開発を進めていく予定です。

【用語解説】

(※1) 熱活性化遅延蛍光 (TADF)

分子が外部からのエネルギー (励起子) を一度蓄えたのち、熱の力で再び光として放出する現象。2012 年に九州大学の安達千波矢教授が、高効率に発光する TADF 材料を開発し、有機 EL の発光材料として世界中で注目されるようになった。

(※2) 2 光子吸収

通常の物質は 1 つの光子を吸収して励起される (1 光子吸収)。これは LED のような弱い光でも起こるが、近赤外光ではエネルギーが不足し、分子を励起することができない。これに対し、2 光子吸収で

は、分子が2つの光子を同時に吸収して励起される。この現象には、レーザーのような強い光が必要であるが、近赤外光でも分子の励起が可能となるため、深部組織への光の到達が可能になり、バイオイメージングや光治療など、体の内部を非侵襲的に観察・操作する医療応用が期待されている。

(※3) スピンの異なる2種類のエネルギー状態

有機分子がエネルギー（励起子）を持つと、電子のスピン（分子固有の小さな磁石のような性質）によって「一重項状態（ S_1 ）」と「三重項状態（ T_1 ）」という2つの異なる励起状態に分かれる。このスピンの違いは、発光の仕方や発光寿命に関わるため、発光材料を開発する上で重要な性質である。通常、OLEDの場合、有機分子が外部から獲得したエネルギーのうち約25%が一重項状態に、75%が三重項状態に分かれ（理論上1:3の割合）、一重項はすぐに光る（ナノ秒程度）一方で、三重項は長い時間（マイクロ秒～ミリ秒）かけて光る、あるいは光らずに失活してしまうこともある。TADFは、この三重項状態の励起子を熱の力で一重項に戻し、再び光らせる技術で、発光効率を最大限に高めるための重要な仕組みである。

(※4) 逆項間交差（RISC: Reversed Intersystem Crossing）

励起三重項状態（ T_1 ）から励起一重項状態（ S_1 ）へのスピン反転を伴う遷移であり、TADFの鍵となる過程である。分子が暗い状態（ T_1 ）から、熱の力で再び明るい状態（ S_1 ）に戻る現象のこと。

(※5) 内部量子効率

光る材料に注入されたエネルギーのうち、実際に光として放出される割合を示す指標。

(※6) 2光子吸収断面積

光子を同時に2つ吸収して分子が反応する「2光子吸収」の起こりやすさの目安を表す数値。この値が大きいほど、少ない光でも効率よく発光することができるため、医療用の深部イメージングやレーザー顕微鏡などに使える優れた材料とされる。

(※7) 発光量子収率

光を当てて発光する材料において、取り込んだエネルギーのうち、どれだけが光として出てくるかを表す割合。

(※8) 構造緩和

分子が光や電気エネルギーを吸収すると、一時的にエネルギーが高い状態へと変化する。このとき、分子はより安定な形に変わろうと緩やかに動く現象が起きる。これを構造緩和という。

(※9) 遷移双極子モーメント

分子が光を吸収してエネルギー状態が変化する際に、どれだけ強く光と反応できるかを表す性質のこと。この値が大きいほど、分子は光を吸収しやすくなる。

(※10) 局在励起（LE: Local Excitation）

分子がエネルギーを獲得して生じた電子分布が、特定の部位に集中して存在している状態を指す。この状態では、遷移双極子モーメントも大きくなり、光を強く吸収できる。

(※11) 電荷移動 (CT: Charge Transfer)

分子がエネルギーを得たのち、電子がドナーからアクセプターへ移動した状態を指す。この状態は、軌道の分布が分離するため、遷移双極子モーメントが小さくなる。一方で、 ΔE_{ST} が小さくなるため、TADF 発光が起こりやすくなる。

(※12) 外部量子効率 (EQE: External Quantum Efficiency)

電流から生成された光が、どれだけ外部に放出されたかを示す発光デバイスの性能指標。

(※13) 時間分解顕微鏡

時間分解顕微鏡 (Time-Resolved Fluorescence Microscopy、特に FLIM: Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy) は、蛍光の強さだけではなく、蛍光の寿命 (エネルギーが励起状態にとどまる時間) を空間的にマッピングする技術のこと。蛍光寿命は pH や酸素濃度などの環境の変化に敏感なため、バイオイメーシングやセンサー開発において高い空間分解能と定量性をもたらす。

【謝辞】

本研究は九州大学エネルギー研究教育機構若手研究者・博士課程学生支援プログラム、JSPS 科研費 (JP23K20039, JP21K20539, JP22K14785, JP23H05406, JP25K18088)、徳山科学技術振興財団、Kyulux、International Integrated Collaboration Project for Kyushu-Okinawa Open University (KOOU) & University Academic Alliance in Taiwan (UAAT)、文部科学省 (MEXT) フェローシップの助成を受けたものです。

【論文情報】

掲載誌: Advanced Materials

タイトル: Unlocking Dual Functionality in Triazine-Based Emitters: Synergistic Enhancement of Two-Photon Absorption and TADF-OLED Performance with Electron-Withdrawing Substituents

著者名: Youhei Chitose,* Gomathi Vinayakam Mageswari, Ryota Zenke, Toshiharu Ide, Shintaro Kohata, Ja-Hon Lin,* Tzu-Chau Lin,* Youichi Tsuchiya, and Chihaya Adachi*

D O I : 10.1002/adma.202509857

【お問合せ先】

<研究に関すること>

九州大学 大学院工学研究院 教授 /

最先端有機光エレクトロニクス研究センター (OPERA) センター長

安達 千波矢 (アダチ チハヤ)

TEL : 092-802-6920 FAX : 092-802-6921

Mail : adachi@cstf.kyushu-u.ac.jp

<報道に関すること>

九州大学 広報課

TEL : 092-802-2130 FAX : 092-802-2139

Mail : koho@jimu.kyushu-u.ac.jp