



研究領域名 動的エキシトンの学理構築と機能開拓

京都大学・大学院工学研究科・教授

いまほり ひろし  
今堀 博

領域番号：20A201 研究者番号：90243261

【本研究領域の目的】

光化学は、エレクトロニクス、エネルギー、医薬・医療、機能性材料など現代社会において多様な貢献を期待されている。その根幹を司るドナー・アクセプター(D・A)相互作用では、今まで電荷移動(CT)を、クーロン相互作用による「静的エキシトン(クーロン力によって束縛された電子と正孔の対の状態及びその概念、と定義する)」として捉えてきた(図1左下)。しかし、D・A系ではそれ以外にも、核や格子の運動、スピンと軌道の相互作用などが動的効果として時間発展的に働くために(この状態及びその概念を「動的エキシトン」と定義する)、従来の捉え方では破綻をきたしている(図1右中)。例えば近年、有機太陽電池(OPV)の発展が目覚ましいが、この光起電力、電流発生の仕組みを静的な枠組み(図1左下)で理解するには限界があり、高効率OPV実現の足かせになっている。さらに、光反応初期におけるこの動的効果を正しく理解するための、精密計測や理論体系は未開拓である。従って人類がD・A相互作用を自在に操るにはほど遠い状況にあり、OPV、有機発光素子(OLED)の高性能化のみならず、光を使った医薬・医療、有機材料の新規機能実現の深刻なボトルネックになっている。本研究では、動的エキシトン効果を利用する精緻な分子設計と、計画研究構成員が独自に構築してきた、世界を先導する高分解能計測・理論的精密解析による分野融合により、上記課題を解決する。また光励起CTにおけるスピン状態を含めた、電子状態間の変換による多様な光機能開拓を、動的相互作用の深

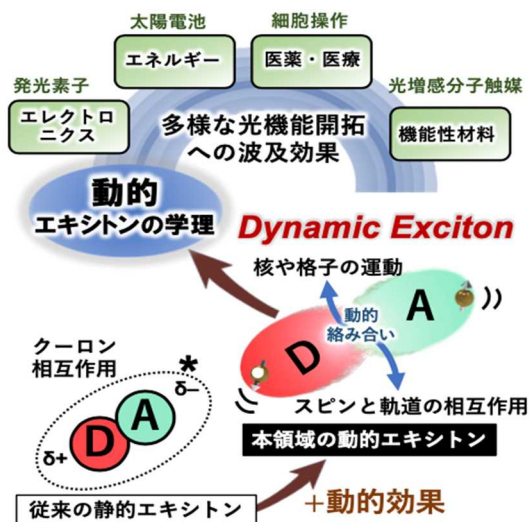


図1.本研究領域の目的

い理解に基づく、分子構造と運動性の巧妙な時空間制御で実現する(図1)。

【本研究領域の内容】

本研究領域では、新規D・A分子の創出とD・Aモデル系の学理構築、OLED、OPVの学理構築と機能向上、合成・生命機能開拓(光細胞操作、光増感分子触媒)の研究課題に着目する。分野融合を基盤とする枠組みにより、非線形な動的エキシトン効果を動的エキシトン創成(A01)、解析(A02)、機能(A03)の3グループで評価・解析する。D・A分子の動的相互作用を有効に引き出すA01グループの精緻設計・合成、A02グループによる先端的磁気共鳴法、時間分解分光計測、計算化学手法を用いた、スピンや分子・格子振動による相互作用機構の解明を経て、A03グループの実在系ではD・A相互作用が階層構造を有する多様な複雑系の光機能開拓に直結させる。動的エキシトンの統一的学理構築と多方面への展開により、既存の光化学の枠から飛躍した新興・融合領域分野としての「動的エキシトン学」を興す。

【期待される成果と意義】

本研究領域では広く光化学を中心とする基礎学理の構築を基盤とした広範な異分野融合を目指すとともに、OPVだけでなく、OLED、光増感分子触媒、光細胞操作など多様な機能開拓を実現するものであり、基礎・応用両局面への格段の発展・飛躍的な展開を図る内容である。

【キーワード】

**エキシトン**：通常は励起状態の電子と正孔の対が静電力によって束縛状態となったものを意味するが、本研究領域では分子D・A系において、励起状態だけでなく、部分的に電荷移動し、かつ励起状態の性質を併せ持つCT状態、及び完全に電子移動した電荷分離状態も含んで包括的に扱う。  
**有機太陽電池**：太陽光・電気エネルギー変換を行うデバイスで、光起電力、電流発生を担う材料が有機系D・A材料から構成される。界面におけるCT状態操作が本研究領域における重要な課題となる。

【領域設定期間と研究経費】

令和2年度－6年度 1,140,800千円

【ホームページ等】

<https://dynamic-exciton.jp>  
[imahori@scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:imahori@scl.kyoto-u.ac.jp)