

	研究代表者	京都大学・化学研究所・教授 梶 弘典（かじ ひろのり）	研究者番号：30263148
	研究課題情報	課題番号：26A201 キーワード：速度定数予測、励起状態ダイナミクス、時空間マルチスケール、非晶凝集系	研究期間：2026年度～2030年度

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

自然界における多くの現象は、一つの出来事の裏で、複数の「素過程」が連続し、また、互いに競合することで成り立っている。このような自然現象に対し、実験的には全過程が繰り込まれた結果を観測することになる。一方、理論・計算においては、その一部の過程のみに注目することが多かった。しかし、その本質の理解のためには、現象に関わるすべての素過程とそれらを包括した全体の両方を解明する必要がある。

このような状況のもと、我々は、最近、有機分子において、複数の過程からなる発光現象全体をその素過程から理解し、定量的かつ包括的に予測できる量子化学計算手法を開発した（図1、*Nat. Commun.* 2024, 15, 4723）。実験的にも、これまで多くの研究がなされてきた「見える過程」に加え、未開拓であった「見えない過程」についても定量的に観測する手法を開発しつつある（*J. Phys. Chem. Lett.* 2019, 10, 2475; *Anal. Chem.* 2019, 91, 11987）。

このような計算と実験の両面からのアプローチを組み合わせ、さらに、速度定数という指標を用いることにより、現実の複雑な現象を、素過程から統一的かつ定量的に理解することが可能になると期待される。これまで展開してきた対象分野はまだ限られているが、この萌芽的な手法をさらに高度化することにより、また、本手法の機能開拓への応用展開により、速度定数によって記述できる広範な分野に学術的な革新を興すことが、本領域の目的である。

芸術の世界において、全体をリズムカルな要素に分割し、それを絵画構築に用いる手法が「キネティシズム」と名付けられたことになぞらえ、「光」を中心とした「kinetics」の学理「-ism」の構築を目的とし、本領域名を「光キネティシズム（フォトネティシズム、photokineticism）」とした。特に、一分子系から分子間相互作用を有する系、最終的には不均一（非晶）凝集系へと展開し、その時空間発展を基礎から理解することを目指す。本領域の研究に基づき、現象の本質の理解と定量的予測を可能にし、広範な分野における新規材料の創出とその応用展開を推進する。この学理構築により、速度定数で記述できるすべての学問領域に対し、新たな変革・転換をもたらす。

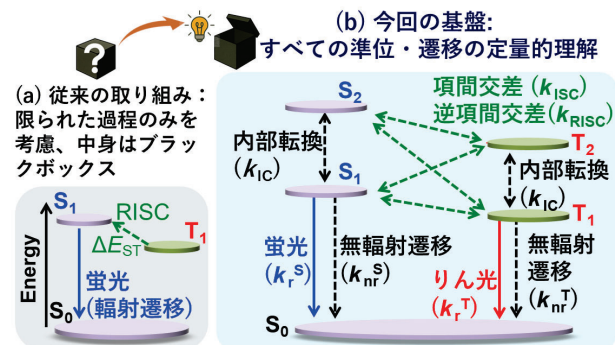


図1 本領域の概念図。これまでブラックボックスであった現象の本質的機構を、関わるすべての素過程の速度定数、量子収率を定量的に明らかにすることにより解明し、フォトネティシズムの学理構築・革新的機能開発を実現する。

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●本領域の研究展開

本領域では、有機光化学の分野をはじめとする広範な分野の基盤となる「速度定数」の予測法を確立する。また、その基盤に基づき、関連する分野の学理を電子レベルの素過程から再構築し、巨視的に発現する各種物性を微視的レベルから根本的に理解する学理を構築する。研究項目A01（設計・計算）、研究項目A02（計測・解析）、研究項目A03（機能）によって構成される本領域で、以下の領域課題1～4を展開し、本領域が掲げるフォトネティシズムの学理構築と各種機能開拓を行う（図2）。これらの研究を通して、我々の目指す分野における国際的優位性、独創性、新規性を革新的に高める。

領域課題1. 速度定数予測法の開拓：本領域のすべての基礎となる速度定数予測法は独創的かつ新規性の高い手法であり、世界に先駆けてその構築に成功したが現状ではまだ萌芽的段階にある。具体的には、振動の影響をまだ一部しか取り込めておらず、また、非晶系における分子間相互作用も明示的に取り込めていない。本研究において、これらの課題に取り組む。この学理構築のためには、実測結果との比較も必須である。特に、高次励起状態を含む過程等の未計測速度定数の測定手法を高度化し、不均一場での励起状態ダイナミクスを精密に解析する。

領域課題2. 発光機能の開拓：有機ELは、発光機能応用の代表例である。これまで我々は、電流から光への変換効率が理論限界（100%）に達する有機ELデバイスを実現するとともに、高い色純度を有する発光の実現にも成功してきた。このような最先端の研究が進められてきた一方、有機ELにおいては高輝度領域で効率が低下するという現象が見られ、また、デバイスの長寿命化についても、研究、実用の両面で、世界中で大きな未解決課題となっている。本研究では系全体を包括的に予測する分子設計により、この未解決問題を世界に先駆けて解決することを目指す。

領域課題3. 光化学反応機能の開拓：我々が展開してきた速度定数予測法は、上記の発光機能のみならず、広く異なる分野への展開が可能である。一つの例として、アルツハイマー病治療に向けた光触媒への展開を進めている。この光触媒は、アミロイドβペプチド存在下では酸化反応によりその凝集を抑制するとともに、非存在下では酸化反応を起こさず副作用を抑制するという優れた選択酸化スイッチング機能を有し、その選択性のメカニズムを本速度定数予測法により解明しつつある。本研究では、さらに優れた光触媒の設計とその実用化に向けて、本手法を展開する。

領域課題4. 光誘起スピン機能の開拓：我々は、独自に開発した色素を精密に集積した金属有機構造体（MOF）材料が示すシングレットフィッションのダイナミクスを超高速度分光により明らかにし、さらに、生成した三重項ペアの量子コヒーレンスを室温で観測することに世界で初めて成功している。また、キラルな集積構造により光スピン機能を変調できることも見出している。本研究では、独自の集積構造変調を活用し、偏極した電子スピンやその量子コヒーレンスおよび電子スピンの絡む速度定数を制御することで、温度や磁場といったパラメータを高精度に観測可能な量子センシング材料の開発を目指す。

以上、一分子から凝集系に渡るマルチスケール空間において、広い時間スケールでの現象全体を、理論・計算、計測の両面からの速度定数予測法に基づき素過程から記述することにより、その系全体の定量的な理解と予測を可能にする。この学理基盤を、発光材料・デバイスのみならず、広範な分野に応用展開し、本領域が掲げるフォトネティシズムの学理構築と各種機能開拓を推進する。

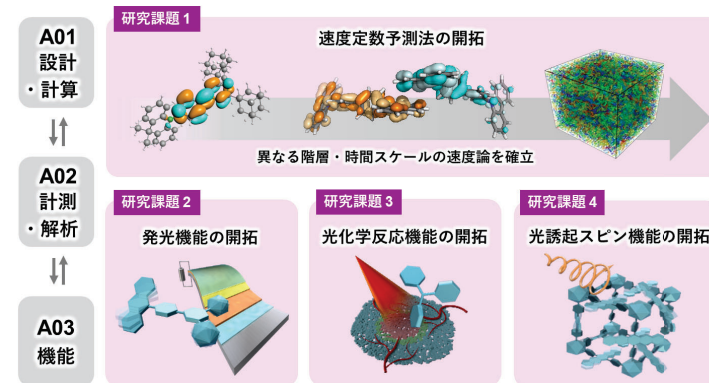


図2 領域全体の組織図。研究体制 A01-A03（縦串）と領域課題 1-4（横串）により、フォトネティシズムの学理構築と機能開拓を推進する。