

令和2年度「学術変革領域研究（A）」新規採択研究領域  
に係る研究概要・審査結果の所見

領域番号	20A201	領域略称名	動的エキシトン
研究領域名	動的エキシトンの学理構築と機能開拓		
領域代表者名 (所属等)	今堀 博 (京都大学・工学研究科・教授)		

(応募領域の研究概要)

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・アクセプター相互作用では、今まで電荷移動を、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）」として捉えてきた。しかし、ドナー・アクセプター系では、それ以外にも、核や格子の運動や、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（動的エキシトン）、従来の捉え方では破綻をきたしている。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、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より、上記課題を解決する。光励起電荷移動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。

(審査結果の所見)

本研究領域は、光エネルギーの効率的利用を目指して、ドナー分子(D)とアクセプター分子(A)が連結したDA連結系における局在化した光励起状態（エキシトン）から $D^+A^-$ 電荷励起状態への変換に焦点を当てた提案である。従来の学理であるマーカス理論に基づいたプリミティブな考え方を、定量的で精度の高いものへと進化させようとするもので、目指すところは学術変革領域研究としてふさわしい。それぞれの専門分野において特徴的で高レベルな成果を上げてきた研究者で構成されており、年齢的な多様性も確保されている。領域のマネジメント計画も優れている。全体的にバランスが取れた構成にはなっているものの、理論化学・生物化学・有機光化学分野がやや手薄であるとも思えるので、公募研究でカバーするなどの工夫が望まれる。また、動的エキシトンという概念がやや不明確であり、マーカス理論を下敷きとしつつそれでは扱えないスピン軌道相互作用、分子のコンフォメーション変化などの効果を検討することで、より精密で定量的な議論を可能にする学理を構築するとした方が理解しやすいこと、あまり“動的”という言葉で研究を縛らないこと、にも留意することが望まれる。