

科学研究費助成事業（基盤研究（S））研究進捗評価

|       |                                       |                               |                                  |
|-------|---------------------------------------|-------------------------------|----------------------------------|
| 課題番号  | 15H05752                              | 研究期間                          | 平成 27(2015)年度<br>～令和元(2019)年度    |
| 研究課題名 | 電荷分離, プロトン移動, 電子伝達, 巨大電子状態揺らぎの非断熱電子化学 | 研究代表者<br>(所属・職)<br>(令和2年3月現在) | 高塚 和夫<br>(京都大学・福井謙一記念研究センター・研究員) |

【平成 30(2018)年度 研究進捗評価結果】

| 評価 | 評価基準  |
|----|---|
| A+ | 当初目標を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる                                |
| ○  | A   |
| A- | 当初目標に向けて概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である |
| B  | 当初目標に対して研究が遅れており、今後一層の努力が必要である                                |
| C  | 当初目標より研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である                |

(意見等)

本研究は、ボルン・オッペンハイマー (BO) 近似を超越して化学現象の本質的理解を拓く非断熱電子動力学の開拓を目指したものであり、新たな理論展開と従来取扱困難であった対象への適用を進めている。

研究代表者を中心に水分子の光分解、マンガン酸化物の光触媒サイクル、時間分解光電子シグナルなどの研究が展開され、良い成果が得られている。また、理論面でも非断熱相互作用による対称性の保存と破れなど当初の予定になかった成果も上がっている。

今後は研究分担者とのより緊密な共同研究を進め、研究遂行に必要な研究員を広く世界から確保して目標を達成することを期待する。

【令和 2 (2020)年度 検証結果】

|      |   |
|------|---|
| 検証結果 | 当初目標に対し、期待どおりの成果があった。   |
| A    | 当初の研究目的である非断熱電子動力学の基礎理論を構築し、電荷分離、プロトン移動、電子伝達、巨大電子状態揺らぎといった化学現象への応用を行い、植物の光合成に関わる電荷移動、プロトン移動、電子伝達の動力的機構の解明、ボロンクラスターのような超高縮重電子系における巨大電子状態揺らぎを考慮した化学結合論の構築といった研究成果を上げている。研究代表者らが提唱する計算手法は、生体反応や触媒反応における複雑な化学現象を再現し、深く理解する上で重要な手法の一つであるので、今後の研究成果発表を通じて、社会へのより一層の周知を期待する。 |