

## 【基盤研究（S）】

### 理工系（化学）



## 研究課題名 光電荷分離の基礎学理構築と新展開

京都大学・物質-細胞統合システム拠点・教授

いまほり ひろし  
今堀 博

研究分野：有機化学、光化学

キーワード：光誘起電子移動、ポルフィリン、ナノカーボン材料、有機太陽電池、光遺伝子工学

#### 【研究の背景・目的】

光電荷分離では分子が光を吸収し生成した励起状態において、電子供与体（D、ドナー）から電子受容体（A、アクセプター）へ電子が移動し、ドナーラジカルカチオンとアクセプターラジカルアニオンからなる電荷分離状態を生成する。前者は強い酸化力を、後者は強い還元力を有するため、物質変換に用いれば人工光合成、電気エネルギー変換に用いれば太陽電池となる。従って、光電荷分離は太陽エネルギー変換において重要な中核となる過程であると言える。

れている。このように、光電荷分離の初期過程において、基底状態に一部失活することは人工光合成、有機太陽電池などの高効率化において深刻な問題であるが、その原因はよくわかっていない。

そこで本研究では、光電荷分離状態を高効率で利用できる学理を確立し、有機太陽電池などの太陽エネルギー変換系の高効率化、および細胞機能制御へと展開していくことを狙う。すなわち、D-A界面において、D-A相互作用の指標である電子カップリングを強い状態から弱い状態へと連続的に変化させることで、エキシプレックス形成と電荷分離状態生成および電荷分離寿命とその生成収率の関係を系統的に明らかにする。それによって、今まで系ごとに違った“光電荷分離状態”に関する統一した学理を構築することを目指す。

#### 【研究の方法】

具体的には次の項目を検討する。(1)単純なD-A連結分子において、架橋部位を工夫することで系統的に電子カップリングを変化させ、高効率な光電荷分離状態生成の学理を構築する。(2)有機薄膜太陽電池への展開を指向し、より複雑なD-A界面で電子カップリングを系統的に変化させることで、光電荷分離状態の高効率利用のための学理を構築する。(3)光電荷分離状態の異分野への応用として、生きた細胞の光機能制御（光遺伝子工学）を目指す。

#### 【期待される成果と意義】

本研究によって電子移動化学に関する基礎的学理が構築できるだけでなく、高効率な太陽エネルギー変換の実現や光電荷分離を用いた新規な細胞工学への展開が期待できる。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

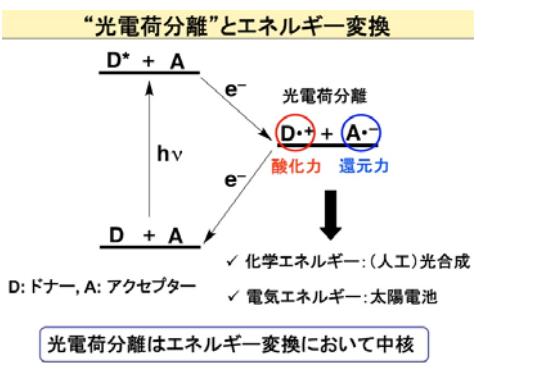
- T. Umeyama and H. Imahori, *J. Phys. Chem. C* (Feature Article) **2013**, *117*, 3195-3209.
- Y. Mori, H. Imahori et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 6092-6095.

#### 【研究期間と研究経費】

平成25年度-29年度  
167,300千円

#### 【ホームページ等】

[http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/%7Emoleng\\_05/](http://www.moleng.kyoto-u.ac.jp/%7Emoleng_05/)  
imahori@scl.kyoto-u.ac.jp



一方、我々は光電荷分離の研究において、数々の世界記録、新概念を提唱し、研究を先導してきた。(1) フラーレンを利用し、光合成をまねた電荷分離寿命として世界最高値を達成した。(2) D-A連結分子を金属電極上に自己組織化した光電変換系で光电流発生効率の世界最高値を実現した。(3) ポトムアップ型の新規太陽電池を創製した。(4) 色素増感太陽電池高効率化のための新規提案を行った。

しかしながら、光電荷分離に関しては未解明の重要な課題が残っている。(1) 我々はD-A間に強い相互作用があるポルフィリン・フラーレン連結分子において、励起状態からまず励起錯体（エキシプレックス）が普遍的に生成し、そのまま速やかに基底状態に失活するか、あるいは電荷分離状態に移行することを初めて報告している。(2) ポルフィリンを用いた色素増感太陽電池において、酸化チタン電極上の色素の傾き角、電子移動特性、太陽電池特性に良好な相関があることを初めて見いだし、かつ光電荷分離状態からの速い失活が一部起こることを明らかにした。また、有機薄膜太陽電池においても初期の光電荷分離状態から一部速い失活が起こることも報告さ