

様 式 F - 7 - 2

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号

1 4 6 0 3

2. 研究機関名

奈良先端科学技術大学院大学

3. 研究種目名

基盤研究(C)（特設分野研究）

4. 補助事業期間

平成27年度～平成29年度

5. 課題番号

1 5 K T 0 1 4 2

6. 研究課題名

量子化学計算によるランタノイド発光センサーの機構解明と配位子デザイン

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
8 0 6 1 6 0 1 1	ハタナカ ミホ 畑中 美穂	研究推進機構	特任准教授

8. 研究分担者

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名

9. 研究実績の概要

ランタノイド錯体の中でもテルビウム錯体は、緑色の鮮やかな発光を示すが、その発光量子収率は配位子等の周囲環境に大きく依存することが知られている。本年度は、ピピリジン誘導体を配位子に持つテルビウム錯体に着目し、その発光量子収率が配位子によって大きく変わる理由について解析を行った。

まず、強い発光を示す錯体として、ピピリジンを配位子に持つテルビウム錯体に着目し、その発光・消光経路を調べた。その結果、発光過程の一つであるピピリジンからテルビウムへの励起エネルギー移動には反応障壁がほとんどないのに対し、消光過程においては、ピピリジンの三重項状態から基底状態への系間交差が律速段階になり、これらはピピリジンの面外変角振動によって誘起されることが分かった。

次に、2つのピピリジンが架橋された配位子を持つテルビウム錯体について同様の解析を行った。この錯体は、ほとんど発光を示さないことが知られているが、上記のピピリジン錯体と異なり、励起エネルギー移動に比較的高い反応障壁があり、なおかつ、消光の律速段階の反応障壁が非常に低いことが分かった。このことから、発光よりも消光過程が速く進行するため、ほとんど光らないと解釈することができた。

さらに、消光を励起する配位子の振動モードは、非常に局所的な動きであるため、結晶中でも抑えることが難しいこと、この振動モードを抑制する配位子を設計することで、発光量子収率の向上が可能であることを示唆することができた。

10. キーワード

(1) 希土類発光

(2) 系間交差

(3) 消光

(4)

(5)

(6)

(7)

(8)

(注)・印刷に当たっては、A4判（縦長）・両面印刷すること。

(1 / 4)

11. 研究発表

〔雑誌論文〕 計(0)件/うち査読付論文 計(0)件 (最終年度分)

/うち国際共著論文 計(0)件 (最終年度分) /うちオープンアクセス 計(0)件 (最終年度分)

著 者 名		論 文 標 題				
雑 誌 名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
オープンアクセス						

〔学会発表〕 計(3)件/うち招待講演 計(2)件 (最終年度分) /うち国際学会 計(1)件 (最終年度分)

発 表 者 名		発 表 標 題	
畑中美穂		自動反応経路探索を用いる不斉触媒反応の機構解明と 機械学習による解析	
学 会 等 名	発 表 年 月 日	発 表 場 所	
第11回 革新的量子化学シンポジウム(招待講演)	2017年05月13日	京都キャンパスプラザ (京都府京都市)	

発 表 者 名		発 表 標 題	
畑中美穂、日下部彩、青木伸		不斉亜鉛触媒を用いるアルドール反応の立体選択性発現機構	
学 会 等 名	発 表 年 月 日	発 表 場 所	
第20回理論化学討論会	2017年05月16日 ~ 2017年05月18日	京都大学時計台国際交流ホール (京都府京都市)	

発表者名	発表標題	
Miho Hatanaka	Global Reaction Route Mapping Study on Asymmetric C-C Bond Formation	
学会等名	発表年月日	発表場所
4th Challenges in Computational Homogeneous Catalysis (招待講演)(国際学会)	2017年06月15日 ~ 2017年06月16日	Nasby Slott, Stockholm, Sweden

〔図書〕 計(0)件 (最終年度分)

著者名	出版社		
書名	発行年	総ページ数	

12. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出願〕 計(0)件 (最終年度分)

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

〔取得〕 計(0)件 (最終年度分)

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

13. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計(0)件 (最終年度分)

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

14. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

(1) 国際共同研究 : -

15. 備考

--