

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	原 洩 祐
研究機関名	北海道大学
所属部署名	化学反応創成研究拠点
役職名	特任准教授
研究課題名	量子化学計算に基づく光機能性分子の自在設計
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本年度は、速度論的解析手法、光機能性分子に対する機構解析、光機能性分子の設計に関する研究において進捗があった。

速度論的解析手法に関する研究では、無輻射失活経路の速度定数予測について理論的研究を進めた。複数の有機化合物に対してポテンシャル交差構造および無輻射失活経路を計算し、ポテンシャル交差構造をあらわに考慮した速度定数予測の適用に向けてデータを整備した。また、単一の電子状態における反応経路が網目状につながれたネットワークデータに対する速度論的解析に関する研究において進展があった。特定の反応物から生成物に至る反応の収率に対する反応素過程の反応障壁による微分を計算することで、複雑なネットワーク上から、収率に大きな影響を与える素過程を抽出できることを示した。

光機能性分子に対する機構解析としては、北海道大学の実験グループが開発を進める光電子移動触媒を用いたラジカル反応と光励起により 2 つの結合が回転する光異性化反応に関して無輻射失活経路を考慮した機構解析を適用した。光電子移動触媒反応に関する研究では、実験的に見つかった反応に対して、光励起からラジカル反応に至るまでの一連の反応機構に対する解析を進めた。また、光異性化反応の解析では、円錐交差探索に基づき光異性化機構を解析した。解析の結果から、主要な失活経路に加えて、光励起後、極稀に進行する可能性のある失活経路を見出し、実験事実と比較した。

光機能性分子の設計に関しては、同領域に所属する相澤直矢博士と協力し、与えられた分子骨格に対して置換基を導入することで発光分子を設計する研究を進めた。化学者が想定する置換基に対して構造揺らぎを考慮した分子構造リストを準備し、量子化学計算に基づく解析を適用する計算スキームを構築した。これにより、数百の分子構造に対して、DFT や TDDFT を用いた系統的な評価が可能になった。