

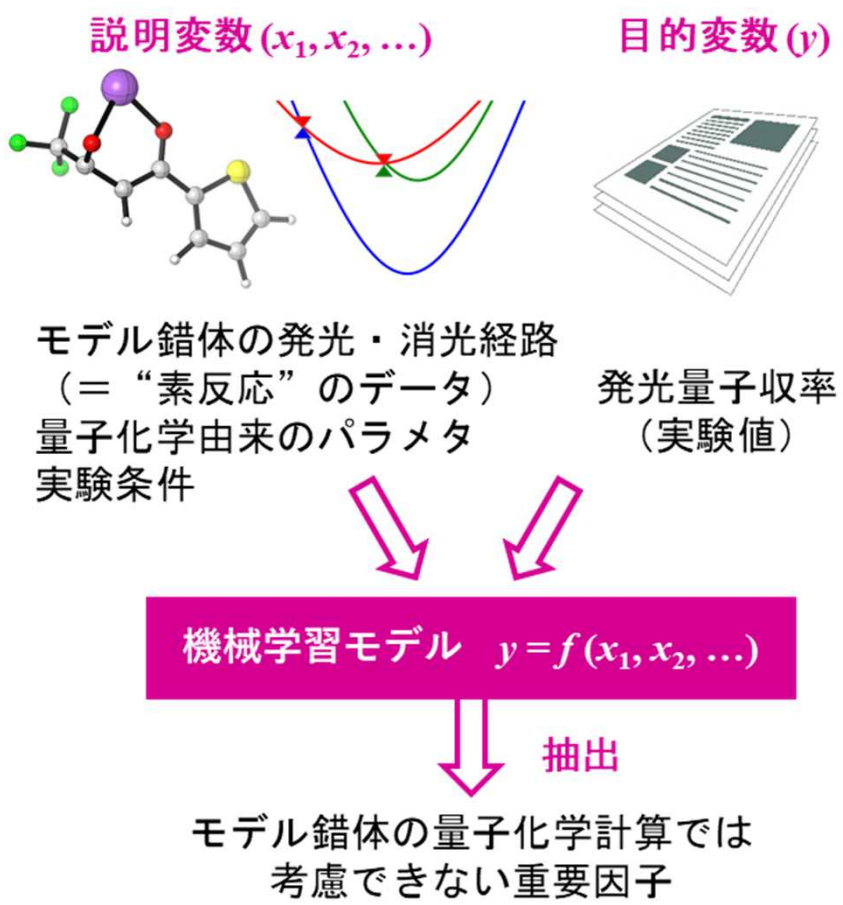
研究の概要

ランタノイド(Ln)の4f-4f遷移に起因する発光は、周囲環境の変化に対して、発光波長はほぼ変化しないが、発光強度のみが大きく変わるという特徴を持つ。特に、TbとEuを含む化合物はそれぞれ緑色・赤色の鮮やかな発光を示すため、幅広い分野で応用されている。そこで、適切な発光強度・または発光強度の外部応答性を示すLn化合物を設計するため、発光強度に最も大きく寄与する因子である発光・消光過程におけるエネルギーと構造変化(基底状態・励起状態のポテンシャルエネルギー曲面(PES)上の局所安定点とPES同士の交差点)に着目し、それらを量子化学計算によって求めた結果をデータベース化した。このデータを元に、発光特性を予測するシステムを構築した。

研究の成果

モデル錯体の発光・消光過程のデータベースから、最も消光を誘起しやすい分子振動モードが局所的な振動モードであり、消光の誘起のしやすさにランキングがあることを見出した。このランキングを元に、消光を誘起しやすい官能基(ランキング上位)をランキング下位の官能基に置換するだけで、高い発光量子収率を示すLn化合物の設計が可能であることを示した。また、このランキングシステムは、Tb化合物にはよく当てはまるものの、Eu化合物に適用すると実験結果と矛盾する事例が複数存在した。そこで、Eu化合物の発光量子収率の実験値を文献から集め、モデル錯体のデータベースのパラメタを説明変数・実験値を目的変数とした機械学習モデルを構築することで、Eu化合物の発光強度を決める因子を新たに抽出することに成功した。

研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的
マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)



参考文献・リンク

https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah27-4.html

M. Hatanaka, T. Wakabayashi, *J. Comput. Chem.* 40, 500 (2019).: M. Hatanaka, A. Osawa, T. Wakabayashi, K. Morokuma, M. Hasegawa, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 3328 (2018).: M. Hatanaka, Y. Hirai, Y. Kitagawa, T. Nakanishi, Y. Hasegawa, K. Morokuma, *Chem. Sci.* 8, 423 (2017).