

平成 2 7 年度科学研究費助成事業（科学研究費補助金）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

特別研究員奨励費

4. 研究 期 間

平成 2 5 年度 ~ 平成 2 7 年度

5. 課 題 番 号

2

5

・

1

0

0

0

1

6. 研究課題名

新規数値モデルによるらせん高分子高次構造体の光学活性反転現象の機構解明

7. 研究代表者

研究 者 番 号	研究 代 表 者 名	所 属 部 局 名	職 名
	スズキ ノゾム	物質創成科学研究科	特別研究員(DC1)
	鈴木 望		

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

キラル分子の集積機構を明らかにし、高次構造に及ぼす分子の幾何的な影響を明らかにするために（１）シリコン原子を含むモデル分子約40種の最安定構造・振動数・エネルギーを量子化学計算MP2/6-311G(d,p)のレベルで得た。（２）（１）の最安定構造・振動数・エネルギーに合う様にMMFF力場のパラメータを最適化した。最適化には独自に開発したプログラムを用いた。（３）得られたパラメータを元に周期pと直径Dを得、実験結果と比較した。

コレステリックハードコアモデルによればp/Dの値が π （ ~ 3.14 ）よりも大きければ高分子集合体の巻き性は高分子の巻き性の反対、 π よりも小さければ同じ巻き性を示すことが予測される。p/Dを見積もるために(a)~(c)の三つの方法を取った。

(a)半経験的量子化学計算PM3を用いて図1の化合物(14量体)の構造を最適化した。このとき、Si-Si-Si-Si(H)=155、側鎖基はall-transとした。(b)上記の MMFF力場のパラメータを用い、CONFEX法を用いた配座探索を行い、最も安定な構造から、pとDの値を得た。(c)既に報告されている化合物(図4)の広角X線散乱の結果より得られたpとDの値から今回の化合物(図1)の値へ外挿することによりpとDを得た。

(a)~(c)より得られた結果と実験結果を比較すると、全ての結果においてp/Dの値が比較的大きければ高分子集合体の巻き性は高分子の巻き性の反対、比較的小さければ同じ巻き性を示すという点に於いてはモデルと一致した。しかし、その反転するPSi2のp/D値は(a)では3.14より小さく、2.0という値を示した。また、(a)では配座の自由度を無視していることから(b)のような配座探索を行って構造因子pとDを決定することが求められる。実際、配座の自由度を最適化した(b)ではPSi2のp/D値は3.1となり、モデルと良い一致を示した。更に類似した化合物から予測される実験PSi2のp/D値も3.2となり、モデルと良い一致を示した。

10. キーワード

(1) キラル

(2) 高分子

(3) らせん

(4) 幾何的構造

(5) 量子化学計算

(6) 分子力学法

(7) 配座探索

(8) 分子間相互作用

11. 現在までの進捗状況

(区分)

(理由)

27年度が最終年度であるため、記入しない。

12. 今後の研究の推進方策

(今後の推進方策)

27年度が最終年度であるため、記入しない。

13. 研究発表(平成27年度の研究成果)

(雑誌論文) 計(2)件/うち査読付論文 計(2)件/うち国際共著論文 計(1)件/うちオープンアクセス 計(0)件

著 者 名		論 文 標 題				
N. Suzuki, Y. Wang, P. Elvati, K. Kim, Z.-B. Qu, S. Jiang, E. Baumeister, J. Lee, B. Yeom, J. H. Bahng, J. Lee, A. Violi, N. A. Kotov		Chiral Graphene Quantum Dots				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
ACS Nano		有	10	2016	1744-1755	該当する
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)						
10.1021/acsnano.5b06369						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

著 者 名		論 文 標 題				
K. Nakabayashi, S. Kitamura, N. Suzuki, S. Guo, M. Fujiki, Y. Imai		Non-Classically Controlled Signs in a Circularly Polarised Luminescent Molecular Puppet: The Importance of the Wired Structure Connecting Binaphthyl and Two Pyrenes				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Eur. J. Org. Chem.		有	1	2016	64-69	-
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1002/ejoc.201501316						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

(学会発表) 計(2)件/うち招待講演 計(0)件/うち国際学会 計(2)件

発 表 者 名		発 表 標 題	
Suzuki, Nozomu Goto, Hitoshi Fujiki, Michiya		Side Chain Length Dependent Chiroptical inversion of Helical Polysilane Aggregates	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所	
15th International Conference on Chiroptical Spectroscopy (CD2015)(国際学会)	2015年08月30日 ~ 2015年09月03日	Conference Hall, Sapporo, Hokkaido, Japan	

発 表 者 名	発 表 標 題	
Suzuki, Nozomu Nakayama, Naofumi Fujiki, Michiya Goto, Hitoshi	Development of force field for diorganopolysilanes: Silicon, carbon, and hydrogen system	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
251st American Chemical Society National Meeting & Exposition (国際学会)	2016年03月10日 ~ 2016年03月17日	San Diego, CA, USA

(図書) 計(0)件

著 者 名	出 版 社		
書 名	発行年	総ページ数	

14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

(出願) 計(0)件

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

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	

15. 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

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

16. 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：国際共同研究である

共同研究相手国	相手方研究機関			
United States	University of Michigan	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-				

17. 備考