

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 23 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17H03034

研究課題名(和文) 新奇光機能ナフタルイミド誘導体の理論・実験融合型基盤研究

研究課題名(英文) Integrated Theoretical and Experimental Studies on Characteristic Photo-induced Properties of Novel Naphthalimide Derivatives

研究代表者

守橋 健二 (Morihashi, Kenji)

筑波大学・数理解物質系・名誉教授

研究者番号：90182261

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,800,000円

研究成果の概要(和文)：ナフタルイミド誘導体は広い分野で分析試薬や抗がん剤として応用が期待されている光機能性化合物である。本研究では、申請者らが開発した新奇NI誘導体1-メチル-3-(N-(1,8-ナフタルイミジル)エチル)イミダゾリウム(MNEI)錯体の光誘起過程を理論と実験の両側面から解明した。MNEI-ハロゲン錯体の蛍光強度を決める因子がCDFT計算から明らかになった。MNEIのカルボン酸存在下での光誘起呈色反応(黄色化)の実験から、カルボン酸からの光誘起電子移動過程でラジカルアニオンが生成していることが明らかになった。このようなラジカルアニオンの存在はTD-DFT計算から理論的にも支持された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ナフタルイミド(NI)誘導体は広い分野で分析試薬や抗がん剤として応用が期待されている光機能性化合物である。このような化合物の光機能性を高めるためには、光誘起電子移動(PET)のメカニズムの詳細に知る必要がある。本研究の学術的な意義は、先端的の量子化学計算と実験研究からMNEIおよび関連化合物に関してUV照射後のPET過程を明らかにできたことである。また、得られた実験結果を機械学習によるデータベースへ反映させることにより、効率的に光機能性化合物を開発できるようになった。MNEIとDNAなどの生体高分子との相互作用研究も始まっており、光機能性化合物のさらなる発展が期待できる。

研究成果の概要(英文)：1,8-Naphthalimide derivatives are expected to be applicable as sensor materials and fluorescent markers for medical and biological purposes by their characteristic photo-induced properties. In this study, novel 1-methyl-3-(N-(1,8-naphthalimidyl)ethyl)imidazolium (MNEI), which has been designed by the authors, was investigated on the photo-induced electron transfer (PET) process in MNEI complexes from both theoretical and experimental sides. From the constrained density functional (CDFT) calculations we clarified the critical factor to determine the fluorescent strength in the UV-irradiated MNEI-halogen complexes. Time-dependent density functional (TD-DFT) and experimental results show that the naphthalimide radical anion is formed on the photo-induced coloration reaction of the MNEI-carboxylate complexes.

研究分野：量子化学

キーワード：アニオンセンサー MNEI 光誘起電子移動 TD-DFT CDFT 励起電子状態

1. 研究開始当初の背景

ナフタルイミド(NI)誘導体は、その特徴的光物性から、有機色素、分子センサー、エイズ治療薬などとして広く応用されてきた。特に注目すべき点は、特定の化学物質を可視化する試薬や、DNA鎖上の特定の塩基配列に作用し照射によりDNA鎖を切断することで、その機能を阻害することから抗癌剤としての応用開発が行われてきた。しかし、国内におけるNI誘導体の研究開発は活況とは言えない状況にあった。これは、原子・分子レベルの原理原則が理解されないまま実験的試行錯誤にならざるを得なかったからである。NI誘導体の光物性や光誘起電子移動過程が微視的レベルで明らかになれば、このような現状を打破できることが期待できる。

2. 研究の目的

申請者らはアニオンセンサーとして汎用性の高い新奇NI誘導体1-メチル-3-(*N*-(1,8-ナフタルイミジル)エチル)イミダゾリウム(MNEI)を開発した。本研究ではMNEI錯体の光誘起電子移動過程を理論・実験の両側面から解明し、MNEIとその類縁体の応用拡充に向けた基盤研究を理論・実験の双方向で情報共有した融合型研究グループで行った。

1) MNEI-ハロゲン錯体では、ハロゲンの電気陰性度の違いによってUV照射後の発光強度が異なる。この蛍光強度の違いは何に起因しているかを理論的に解明する。

2) 多価カルボン酸であるクエン酸について、照射後のMNEI錯体は特異な凝集構造体を形成する。その特異性を励起状態の酸解離定数の理論計算から明らかにする。

3) カルボン酸類に対するMNEIのアニオンセンサーとして光特性を評価するために、MNEI-カルボン酸錯体の蛍光強度とUV照射後の呈色反応を決める因子を理論的に明らかにする。

4) 1,8-ナフタルイミド誘導体の光誘起電子移動過程について、その反応機構を実験的に明らかにする。多価カルボン酸に対してもアニオンセンサーとなる新たなNI誘導体の開発を試みる。

3. 研究の方法

研究目的1)～3)は、密度汎関数(DFT)計算を用いた構造最適化によってMNEI錯体の安定構造を求める。研究目的1)では、主に制約密度汎関数(CDFT)計算を用い、研究目的2、3)の励起状態にあるMNEI錯体の安定構造は時間依存密度汎関数(TD-DFT)計算を用いる。研究目的4)では、MNEIと多価カルボン酸との錯体から、フォトクロミズム現象を検証する。ゲスト分子の分子構造依存性を検討するため、種々のカルボン酸を用いて網羅的なスクリーニングを行う。カルボン酸間の鎖長や分子構造変え、色変化との相関を得ることで、フォトクロミズム誘起に適した分子構造を特定する。呈色反応後の凝集構造の違いを核磁気共鳴スペクトルと赤外分光法で解析する。

4. 研究成果

1) MNEI-ハロゲン錯体の光誘起電子移動過程についての理論研究

MNEI は蛍光強度に基づいてアニオンの電気陰性度を推定できる有用なセンサーになり得る。蛍光強度を決める因子を明らかにするために制約密度汎関数(CDFT)法を MNEI-ハロゲン錯体に適用した。CDFT 法は指定した分子領域に電子数を固定できるため、電子移動(ET)反応系に有効な計算方法である。ここでハロゲンとして F, Cl, Br, I の4種の陰イオンを対象とした。CDFT 計算から求めたポテンシャルエネルギー曲面の解析から、MNEI のナフタルイミド (NI) 環部位からイミダゾリウム (IZ) 環部位への分子内 ET 状態が UV 吸収および蛍光スペクトルに寄与していることが示された。また、MNEI とハロゲン陰イオン間の分子間 ET 状態が蛍光スペクトルの消失過程に関与していることがわかった。ハロゲンの電気陰性度が $F > Cl > Br > I$ と減少するにつれて、分子内 ET 状態と分子間 ET 状態のエネルギー差が減少することが CDFT 計算から示された。したがって、分子内 ET 状態と分子間 ET 状態のエネルギー差が MNEI-ハロゲン錯体の蛍光強度を決める重要な因子であることが明らかになった。

2) クエン酸の光誘起プロトン解離についての理論研究

MNEI との錯体形成においてもクエン酸の特異性が確認されており、プロトンがすべてとれたクエン酸を MNEI とともに光照射すると、分子数の比で MNEI : クエン酸 = 1 : 3 の錯体を形成する。この反応は電荷の比が 1 : 9 となるような静電反発を無視した錯体の形成を示唆しているが、生成過程の解明が課題となっていた。本研究ではこのような特異な性質を持つクエン酸に着目し、基底状態・励起状態でのプロトンの有無を酸解離定数 (pK_a) の計算で求めた。基底状態の pK_a に注目すると、 $pK_a 1$, $pK_a 2$, $pK_a 3$ については、おおそ実験値に近い計算結果が得られている。算出した UV-Vis スペクトルどのプロトン化状態においても、230-250 nm の間にピークがあった。 $pK_a 1^*$, $pK_a 2^*$ については、基底状態よりも小さい値となる一方で、 $pK_a 3^*$ では 9.4 と大きい値が算出された。この結果より、全てのプロトンが取れると励起状態においては不安定になってしまうことを示唆しており、長時間、紫外線照射されたクエン酸では、プロトンが一つだけ付加した構造が安定化しうることを理論的に示した。

3) MNEI-カルボン酸錯体の光誘起電子移動過程についての理論研究

カルボン酸類について、MNEI のアニオンセンサーとしての特性を評価した。MNEI とカルボン酸は等濃度の水溶液に UV 照射するとカルボン酸の種類に応じて蛍光強度が変化する。さらに UV 照射を続けるとカルボン酸の種類に応じて水溶液が黄色に呈色する。具体的には酢酸、コハク酸は強い蛍光が観測されるが、安息香酸とフェニル酢酸の蛍光は弱い。また、コハク酸、フェニル酢酸の水溶液は UV 照射後、黄色に呈色するが、酢酸と安息香酸の水溶液では、このような呈色反応は見られない。これらの実験結果を理論的に解明するために、MNEI-カルボン酸アニオン系 (計算対象としたカルボン酸は酢酸、コハク酸、安息香酸、フェニル酢酸である) の安定構造について、DFT 計算で構造最適化を実行した。溶媒効果は IEF-PCM 計算で取り入れ、カルボン酸と MNEI との分子間相互作用を適切に評価するために、Grimme らの分散補正項を加えて構造最適化計算を行った。得られた最適化構造を用いて、時間依存密度汎関数(TD-DFT)計算より UV 吸収スペクトルを再現した。また、

蛍光スペクトルを解析するために、いくつかの励起一重項状態にある MNEI-カルボン酸錯体の最適化構造を TD-DFT 計算から求めた。

以上の計算から、MNEI-カルボン酸系で、400 nm 付近に観測された強い蛍光ピークは MNEI のナフタルイミド環部位の π - π 遷移によるものであることがわかった。これらの蛍光強度の傾向は酢酸、コハク酸では強く、安息香酸、フェニル酢酸では弱くなることが TD-DFT 計算の振動子強度から示すことができた。このような蛍光強度の傾向は次のように理由付けられる。フェニル基を有するカルボン酸では、蛍光強度に寄与するナフタルイミド (NI) 環部位の π 軌道がカルボン酸のフェニル基にまで広がるのに対し、酢酸、コハク酸系では、このような π 軌道の広がりは見られないためである。また、MNEI-カルボン酸アニオン水溶液が黄色に呈色する原因は、UV 吸収によってカルボン酸アニオンから MNEI へ光電子移動 (PET) が起こり、MNEI の NI 環部位はラジカルアニオンになる。このことは最低励起一重項状態にある MNEI-カルボン酸アニオン錯体の最適化構造から確かめることができる。この錯体の最適構造から MNEI 部分を取り出し、TD-DFT 計算を実行すると 410 nm に強い UV 吸収ピークがあり、この水溶液は黄色となることがわかる。呈色化の原因は PET 後に生成した NI 環ラジカルアニオンであることが理論的に裏付けられた。カルボン酸に対し MNEI 呈色反応の有無は、次のように説明できる。NI 環ラジカルアニオン状態にある 4 種の MNEI-カルボン酸錯体の最適構造を比較すると、呈色反応が見られなかった酢酸、安息香酸は、MNEI と水素結合が弱く、呈色反応が見られたコハク酸、フェニル酢酸は分子構造が柔軟であるため、前者と比べ MNEI と有利な水素結合を形成できる。したがって、呈色反応の有無は、PET 後に生成した NI 環ラジカルアニオン状態にある MNEI 錯体の安定性に依存することが分かった。

4) 1,8-ナフタルイミド誘導体の光誘起電子移動過程についての実験研究

1-(メチル)-3-(N-(1,8-ナフタルイミジル)エチル)イミダゾリウム (MNEI) 及び 3-(N-(1,8-ナフタルイミジル)エチル)トリメチルアンモニウム (TENI) のカルボン酸存在下での光誘起呈色反応 (黄色化) の理論計算及び実験から得られた知見からカルボン酸からの光誘起電子移動 (PET) でラジカルアニオンが生じる理由を考察し、以下のように結論付けた。

MNEI や TENI は、I⁻ や Br⁻ のような電気陰性度の低いアニオンとの錯体を形成すると、PET により強く消光する。しかし、I⁻ や Br⁻ で色変化が起きないのは、ラジカルアニオンから I⁻ や Br⁻ のラジカルカチオンへの電子移動により瞬時にラジカルが失活するからと考えられる。一方、CH₃COO⁻ の場合、わずかに消光が観察されることから、CH₃COO⁻ でも低確率で PET は起こるが、大部分のラジカルアニオンは同様な経路で失活すると考えられる。一方、コハク酸のような複数のカルボキシ基を含む分子や、ラウリン酸のような両親媒性のカルボン酸の場合は、PET によりラジカルアニオンが生成する。MNEI の光反応 (蛍光/消光・黄色化) の機械学習から、黄色化に重要な要素として、分子のかさ高さが示唆されていることから、かさ高いカルボン酸の場合は、PET が起こった後に、MNEI-カルボン酸錯体からカルボン酸が遊離することで、ラジカルアニオンが生成したと考えられる。つまり、不安定な錯体間での PET がラジカルアニオン生成の要因であると結論できる。

TENI が酢酸アニオンに対してラジカルアニオンの生成に伴う黄色化を起こしにくいのにに対して、N,N'-ビス[2-(トリメチルアンモニウム)エチル]-1,8:4,5-ナフタレンテトラカルボックスジイミド (TENDI) は、酢酸アニオンに対してラジカルアニオンの生成に伴う紫色化が

起きやすい。そこで、TENDI のカルボン酸センサーへの応用を検討した。酢酸ナトリウムを用いてカルボキシ基の濃度と紫色化の度合いの関係を調査した結果、紫色化は、2 次の Hill の式で近似できることが分かった。つまり、TENDI を用いる酢酸の定量が可能であることが分かった。また、コハク酸やアジピン酸のようなカルボキシ基を 2 か所有する分子でも同様な検量線を作成できることが分かった。一方、電子供与可能な箇所が 3 か所以上あるカルボン酸誘導体では、茶色の不溶物が生成することが分かった。ナフタレンジイミド誘導体は、2 電子還元が起きることが報告されていることから、茶色の沈殿は TENDI の 2 電子還元によって生成したと推測された。以上から、TENDI を用いることで、ラジカルアニオンの生成によりカルボン酸の存在を視覚的に検出可能であり、酢酸やコハク酸のような分子の定量にも利用可能であることが分かった。

また、MNEI の光学特性を調査する過程で、アニオン性多糖存在下で MNEI のエキシマ一発光が増強される現象を発見した。当初の計画には無かったが、アニオン性多糖のセンシング技術は報告例が少なく、学術的に貴重であることから、MNEI を用いるアニオン性多糖のセンシングに関する研究も行った。その結果、MNEI のエキシマ一発光とモノマー発光の強度比を比較することで、カルボキシ基を有する多糖と硫酸基を有する多糖を識別できることを明らかにした。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 7件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Izawa Hironori, Yasufuku Fumika, Nokami Toshiki, Ifuku Shinsuke, Saimoto Hiroyuki, Matsui Toru, Morihashi Kenji, Sumita Masato	4. 巻 6
2. 論文標題 Unique Photophysical Properties of 1,8-Naphthalimide Derivatives: Generation of Semi-stable Radical Anion Species by Photo-Induced Electron Transfer from a Carboxy Group	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 13456 ~ 13465
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c01685	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Fujita Takehiro, Terayama Kei, Sumita Masato, Izawa Hironori, Tsuda Koji, Morihashi Kenji	4. 巻 -
2. 論文標題 Machine Learning Analysis for Photo-Induced Phenomena of 1-Methyl-3-(N-(1,8-Naphthalimidyl)ethyl)imidazolium Salts	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ChemRxiv	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.26434/chemrxiv.13259726.v1	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 小野澤 周, 松井 亨, 西村 賢宣, 守橋 健二	4. 巻 18
2. 論文標題 アントラセン - ウレア誘導体の励起状態プロトン移動における 蛍光挙動に関する解析	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem. Jpn.	6. 最初と最後の頁 254-256
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2019-0050	査読の有無 有
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	国際共著 -
1. 著者名 H. Izawa, * M. Wada, S. Nishino, M. Sumita, T. Fujita, K. Morihashi, S. Ifuku, M. Morimoto, H. Saimoto	4. 巻 91
2. 論文標題 Discrimination of anionic polysaccharides via monomer-excimer switching and photo-induced colorimetric reaction of 1-methyl-3-(N-(1,8-naphthalimidyl)ethyl)imidazolium	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1220-1225
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20180128	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 T. Matsui, K. Yamamoto, T. Fujita, K. Morihashi	4. 巻 122
2. 論文標題 Molecular Dynamics and Quantum Chemical Approach for the Estimation of an Intramolecular Hydrogen Bond Strength in Okadaic Acid	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 7233-7242
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b03272	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Matsui Toru, Shigeta Yasuteru, Morihashi Kenji	4. 巻 13
2. 論文標題 Assessment of Methodology and Chemical Group Dependences in the Calculation of the pKa for Several Chemical Groups	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J.Chem.Theory Comput.	6. 最初と最後の頁 4791 ~ 4803
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.7b00587	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Otsuka Takao, Sumita Masato, Izawa Hironori, Morihashi Kenji	4. 巻 20
2. 論文標題 Theoretical study on photo-induced processes of 1-methyl-3-(N-(1,8-naphthalimidyl)ethyl)imidazolium halide species: an application of constrained density	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Phys.Chem.Chem.Phys. (Back Cover)	6. 最初と最後の頁 3911 ~ 3917
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7cp07877c	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Fujita Takehiro, Matsui Toru, Sumita Masato, Imamura Yutaka, Morihashi Kenji	4. 巻 693
2. 論文標題 Theoretical study on naphthobis(chalcogenadiazole) conjugated polymer systems and C61 derivative as organic photovoltaic semiconductors	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem.Phys.Lett.	6. 最初と最後の頁 188 ~ 193
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2018.01.021	査読の有無 有
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	国際共著 -

〔学会発表〕 計36件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 井澤 浩則、安福 文香、森本 稔、齋本 博之、伊福 伸介
2. 発表標題 ナフタルイミド誘導体のユニークな光学的性質：カルボキシ基からの光誘起電子移動
3. 学会等名 第69回高分子討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Morihashi, T. Matsui, M. Sumita, H. Izawa
2. 発表標題 Theoretical Analysis on Fluorescent Processes in Complexes of 1,8-Naphthalimide Derivative with Several Carboxylates
3. 学会等名 PacifiChem2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 安福文香、井澤浩則、伊福伸介、森本稔、齋本博之
2. 発表標題 カチオン性レセプターを有するナフタルイミド誘導体の光誘起呈色反応メカニズムの解明
3. 学会等名 2019年日本化学会中国四国支部大会 徳島大会 徳島大学常三島キャンパス (徳島)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 安福文香、井澤浩則、伊福伸介、森本稔、齋本博之
2. 発表標題 光機能性ナフタルイミド誘導体の呈色反応メカニズム
3. 学会等名 第35回 若手化学者のための化学道場 松江ニューアーバンホテル (松江)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 安福文香、井澤浩則、伊福伸介、森本稔、齋本博之
2. 発表標題 光機能性ナフタルイミド誘導体の開拓
3. 学会等名 第68回高分子学会年次大会 大坂府立国際会議場（大阪）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 尾崎 大和、藤田 健宏、松井 亨、寺山 慧、隅田 真人、守橋 健二
2. 発表標題 長距離補正密度汎関数における領域分割パラメータの簡便な決定法
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会 広島JMSアステールプラザ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小野澤 周、松井 亨、西村賢宣、守橋 健二
2. 発表標題 アントラセン-ウレア誘導体と酢酸イオンとの水素結合の理論的解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会 広島JMSアステールプラザ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 尾崎 大和、藤田 健宏、松井 亨、寺山 慧、隅田 真人、守橋 健二
2. 発表標題 長距離補正密度汎関数における領域分割パラメータの簡便な決定法
3. 学会等名 第13回分子科学討論会2019名古屋 名古屋大学（東山キャンパス）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小野澤 周, 松井 亨, 西村賢宣, 守橋 健二
2. 発表標題 アントラセン-ウレア誘導体と酢酸イオンとの水素結合の理論的解析
3. 学会等名 第13回分子科学討論会2019名古屋 名古屋大学(東山キャンパス)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 IWAI, Yudai; MATSUI, Toru; OTSUKA, Takao; SUMITA, Masato; IZAWA, Hironori; MORIHASHI, Kenji
2. 発表標題 A computational approach to the intercalation of naphthal imido derivative into DNA
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会 (東京理科大学 野田キャンパス)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 TOSAKA, Kana; OSAKI, Yamato; MATSUI, Toru; MORIHASHI, Kenji
2. 発表標題 A semiempirical improvement of solvent model by machine learning
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会 (東京理科大学 野田キャンパス)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 TANAKA, Yoshihiro; MATSUI, Toru; OTSUKA, Takao; SUMITA, Masato; IZAWA, Hironori; MORIHASHI, Kenji
2. 発表標題 A theoretical study on molecular cluster of citric acid
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会 (東京理科大学 野田キャンパス)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 FUJIWARA, Jun; OSAKI, Yamato; VLADIMIR YA., Lee; MATSUI, Toru; MORIHASHI, Kenji
2. 発表標題 Computational chemical verification of activation of [R3Si-IPr] -Pd catalyst precursor in Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会 (東京理科大学 野田キャンパス)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 ONOZAWA, Shu; ONOZAWA, Shu; NISHIMURA, Yoshinobu; MORIHASHI, Kenji
2. 発表標題 Correlation between excited state inter-molecular-proton transfer and pKa of aromatic urea derivatives
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会 (東京理科大学 野田キャンパス)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 KAWAGUCHI, Yukari; MORIHASHI, Kenji; MATSUI, Toru
2. 発表標題 Prediction of hole mobilities using modified Marcus equation
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会 (東京理科大学 野田キャンパス)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 和田 真由子、井澤 浩則、伊福 伸介、森本 稔、齋本 博之
2. 発表標題 カチオン性レセプターを有する1,8-ナフタルイミド誘導体を用いるアニオン性多糖の識別
3. 学会等名 第33回中国四国地区高分子若手研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 和田 真由子、井澤 浩則、伊福 伸介、森本 稔、齋本 博之
2. 発表標題 カチオン性レセプターを有する1,8-ナフタルイミド誘導体のモノマー・エキシマ スイッチングと光誘起呈色反応によるアニオン性多糖のセンシング
3. 学会等名 第67回高分子討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 和田 真由子、井澤 浩則、伊福 伸介、森本 稔、齋本 博之
2. 発表標題 カチオン性レセプターを有する1,8-ナフタルイミド誘導体のエキシマ /モノマースイッチングによるアニオン性多糖のセンシング
3. 学会等名 第67回高分子学会年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中 良拓、松井 亨、守橋 健二
2. 発表標題 分子動力学法によるクエン酸のプロトン化状態の解析
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤田 健宏、寺山 慧、隅田 真人、井澤 浩明、守橋 健二、津田 宏治
2. 発表標題 1-メチル-3-(N-(1,8-ナフタルイミジル)エチル)イミダゾリウム塩の発光・呈色推定モデル
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 MORIHASHI, Kenji; KUBOTA, Takumi
2. 発表標題 Examination of electron transfer reaction rate by modified Marcus equation
3. 学会等名 日本化学会第99回春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 TAKEMURA, Fumihide; LEE, Vladimir Ya.; MORIHASHI, Kenji
2. 発表標題 Pyramidanes: Study of the Electronic Structures of Pyramidal Compounds and their NMR Properties
3. 学会等名 日本化学会第99回春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 ONOZAWA, Shu; MORIHASHI, Kenji; MATSUI, Toru
2. 発表標題 Theoretical analysis of hydrogen bond between anthracene-urea derivative and acetate anion
3. 学会等名 日本化学会第99回春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 OSAKI, Yamato; FUJITA, Takehiro; MATSUI, Toru; SUMITA, Masato; MORIHASHI, Kenji
2. 発表標題 Determination of the range separation parameter in LC- PBE using machine learning
3. 学会等名 日本化学会第99回春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 和田 真由子、井澤 浩則、伊福 伸介、森本 稔、齋本 博之
2. 発表標題 1,8-ナフタルイミド誘導体のエキシマ 発光を利用したアニオン性多糖のセンシング
3. 学会等名 第66回高分子討論会 愛媛大学 城北キャンパス(愛媛)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 和田 真由子、井澤 浩則、伊福 伸介、森本 稔、齋本 博之
2. 発表標題 イミダゾリウムを有する1,8-ナフタルイミド誘導体を用いるアニオン性多糖のセンシング(支部長賞受賞)
3. 学会等名 第32回中国四国地区高分子若手研究会(山口)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 和田 真由子、井澤 浩則、伊福 伸介、森本 稔、齋本 博之
2. 発表標題 1,8-ナフタルイミド誘導体のエキシマ 発光を利用した生体高分子のセンシング(優秀ポスター賞受賞)
3. 学会等名 2017年日本化学会中国四国支部大会 鳥取大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 和田 真由子、井澤 浩則、伊福 伸介、森本 稔、齋本 博之
2. 発表標題 カチオン性レセプターを有する1,8-ナフタルイミド誘導体を用いるコンドロイチン硫酸のセンシング
3. 学会等名 第31回日本キチン・キトサン学会大会 沖縄コンベンションセンター(沖縄)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 和田 真由子、井澤 浩則、伊福 伸介、森本 稔、齋本 博之
2. 発表標題 カチオン性レセプターを有する1,8-ナフタルイミド誘導体を用いる生体高分子のセンシング
3. 学会等名 第66回高分子学会年次大会 幕張メッセ(千葉)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 藤田 健宏、松井 亨、守橋 健二
2. 発表標題 有機薄膜太陽電池材料の電荷移動状態の安定性と反応速度定数についての理論的研究
3. 学会等名 第11回 分子科学討論会 (東北大学)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 藤田 健宏、松井 亨、守橋 健二
2. 発表標題 有機薄膜太陽電池材料の電荷移動状態の安定性と反応速度定数についての理論的研究 (優秀ポスター賞受賞)
3. 学会等名 第7回CSJ化学フェスタ2017 船堀
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 大塚教雄、隅田真人、井澤 浩則、守橋健二
2. 発表標題 ナフタルイミド化合物-ハロゲン系の光誘起過程に関する理論的研究
3. 学会等名 第31回 分子シミュレーション討論会 金沢商工会議所
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 添田皓輝、松井亨、守 橋健二
2. 発表標題 銀イオン錯体内における金属-金属結合の 密度汎関数理論による解析
3. 学会等名 第31回 分子シミュレーション討論会 金沢商工会議所
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 大高秀仁、大塚教雄、隅田真人、井澤浩則、松井亨、守橋健二
2. 発表標題 カルボン酸塩・ナフタルイミド化合物錯体の光誘起過程の理論的解析
3. 学会等名 第31回 分子シミュレーション討論会 金沢商工会議所
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 大高秀仁、大塚教雄、隅田真人、井澤浩則、松井亨、守橋健二
2. 発表標題 カルボン酸塩・ナフタルイミド化合物の光誘起過程の理論的解析
3. 学会等名 第98回日本化学会春季年会（日本大学理工学部 船橋キャンパス）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中良拓、松井亨、守橋健二
2. 発表標題 水溶液中におけるクエン酸のプロトン化状態の解析
3. 学会等名 第98回日本化学会春季年会（日本大学理工学部 船橋キャンパス）
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	大塚 教雄 (Otsuka Takao) (30465968)	国立研究開発法人理化学研究所・生命機能科学研究センター・研究員 (82401)	
研究分担者	井澤 浩則 (Izawa Hironori) (50643235)	鳥取大学・工学研究科・准教授 (15101)	
研究分担者	松井 亨 (Matsui Toru) (70716076)	筑波大学・数理物質系・准教授 (12102)	

7. 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

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------