

## フェーリング溶液中における酒石酸と銅の錯イオンに関する 理論的研究

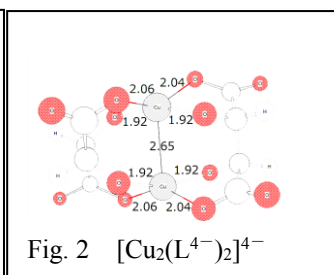
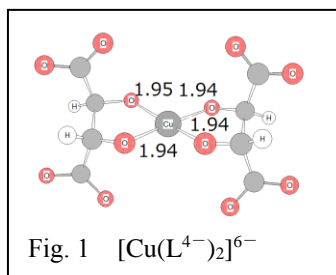
(長崎県立長崎西高等学校<sup>1</sup>、長崎大学大学院工学研究科<sup>2</sup>、岐阜大学地域科学部<sup>3</sup>、分子科学研究所<sup>4</sup>、総合研究大学院大学<sup>5</sup>) ○森崎 皓陽<sup>1</sup>、川原 惟人<sup>1</sup>、麻生 遥史<sup>1</sup>、浜口 天真<sup>1</sup>、赤坂 一成<sup>1</sup>、江頭 基靖<sup>1</sup>、岩本 崇弘<sup>1</sup>、権藤 好信<sup>1</sup>、野口 大介<sup>1,2</sup>、橋本 智裕<sup>3</sup>、岩田 末廣<sup>4,5</sup>  
Theoretical Study on Complex Ions Composed of Tartrate and Cu(II) in Fehling's Solution

Koyo Morisaki<sup>1</sup>, Tadato Kawahara<sup>1</sup>, Haruhumi Aso<sup>1</sup>, Tenma Hamaguchi<sup>1</sup>, Issei Akasaka<sup>1</sup>, Motoyasu Egasira<sup>1</sup>, Takahiro Iwamoto<sup>1</sup>, Yoshinobu Gondoh<sup>1</sup>, Daisuke Noguchi<sup>2,1</sup>, Tomohiro Hashimoto<sup>3</sup>, Suehiro Iwata<sup>4,5</sup> (<sup>1</sup> Nagasakinishi High School, <sup>2</sup> Graduate School of Engineering, Nagasaki University, <sup>3</sup> Faculty of Regional Studies, Gifu University, <sup>4</sup> Institute of Molecular Science, <sup>5</sup> Graduate University of Advanced Study)

Fehling's test is widely used to detect reducing substances such as aldehydes<sup>1)</sup>. However, there are few theoretical studies on complex ions composed of tartaric acid and Cu(II), which are principal species involved in Fehling's solution. Hörner et al. have proposed several structures of copper tartrate complexes using various functionals such as B3LYP and TZVP basis set<sup>2)</sup>. In this work, we studied geometric and electronic structures of the complex ions *in silico*, and compared UV-Vis absorption spectra in solution with those calculated by TDDFT. As a result, it was found that the mononuclear complex proposed by Hörner et al. (Fig. 1) does not cause d-d transition due to its high symmetry. It was also revealed that the structure shown in Fig. 2 causes strongest d-d transition among the binuclear complexes whose symmetry is broken.

**Keywords :** Fehling's solution; Cu(II) complex; TDDFT; UV-Vis absorption spectra; d-d transition

フェーリング試験はアルデヒド類の還元性確認に広く用いられる<sup>1)</sup>。しかし、フェーリング反応に関与している酒石酸(LH<sub>4</sub>)と銅(II)の錯イオンについての理論的研究例は非常に少なく、形成される錯イオンの構造については、いまだ不明な部分が多い。Hörner らは、B3LYP などの様々な汎関数と基底関数に TZVP を用いて、酒石酸と銅の錯イオンの様々な構造を提案している<sup>2)</sup>。本研究では、TDDFT 計算による UV-Vis スペクトルを実験値と比較することで、溶液中における酒石酸と銅の単核及び2核の錯イオンの様々な構造を解析した。その結果、Fig. 1 で示される Hörner がフェーリング液中で存在するとしている単核錯体の構造では、対称性の高さから d-d 遷移を起こさないことが分かった。また、対称性が壊れる2核錯体の中では、Fig. 2 に示される構造が、もっとも強い d-d 遷移を引き起こすことが分かった。



- 1) 野口大介 化学と教育 **2019**, 67, 254-257
- 2) Hörner et al. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2016**, 1798-1807