様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　４ 年　６ 月　８ 日現在

機関番号：８２６４８
研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）
研究期間：2016～2020
課題番号：１６Ｈ０６５１１

研究課題名（和文）非対称金属配位場を有する超分子系の構造・物性・反応に関する理論研究

研究課題名（英文）Theoretical Study on the Structures, Properties and Reactions of Supramolecules including Asymmetric Coordination

研究代表者
江原　正博（Ehara, Masahiro）

大学共同利用機関法人自然科学研究機構（岡崎共通研究施設）・計算科学研究センター・教授

研究者番号：８０２６０１４９

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）：本研究課題では，複雑系の非対称性を記述するキラル基礎理論を開発し，理論・計算化学に基づいて「配位アシンメトリー」に関する基礎研究を実施することを目的とした。具体的には下記の複数の研究課題に取り組んだ。(1)複雑系キラル基礎理論の開発とキラル光物性増幅の理論設計，(2)多孔性分子結晶MMFの特異的触媒反応の反応機構，(3)白金錯体のリン光発光および凝集誘起発光の熱耐性，(4)銀ナノクラスターの構造と電子状態およびキラル光物性の理論研究を実施した。これらの研究では実験研究者との共同研究を中心として推進し，分子の非対称性に関わる様々な化学事象の理論解析や分子設計を実施することを目的とした。

研究成果の学術的意義や社会的意義
近年，分子系や分子集合系の非対称性に基づく科学は幅広い研究分野で進展しており，光物性，触媒反応，分子認識など様々な機能に関する研究が進められている。その中でもキラル光物性や不斉触媒反応は，社会的関心も高く，研究の発展が期待されており，本新学術領域「配位アシンメトリー」はその重要課題に取り組む研究領域であった。本研究課題では，独自の理論を基盤として，複雑・複合系に適用できる電子状態理論を進展させ，様々な超分子系のキラル光物性や触媒反応を研究した。本研究課題の成果は，複雑系のキラル光物性や不斉触媒反応に関する発展的研究に影響を与え，光デバイス開発や医薬品開発の分野に応用されることが期待できる。

研究成果の概要（英文）：In this research project, we developed basic chiral theories describing asymmetry in complex systems and conducted basic researches on "coordination asymmetry" based on theoretical and computational chemistry. Specifically, research was conducted on the following several research topics; (1) Development of basic theories of chirality for complex systems and theoretical design of amplification of chiroptical properties, (2) Reaction mechanism of specific catalytic reactions in metal-macrocyclic framework, (3) Heat-resistant properties of phosphorescence and aggregation-induced luminescence of platinum complexes, (4) Structures, electronic structures, and chiroptical properties of silver nanoclusters. These studies were promoted mainly in collaboration with experimental researchers and aimed at conducting theoretical analysis and molecular design of various chemical events related to molecular asymmetry.

研究分野：理論化学

キーワード：キラル基礎理論　量子逆設計理論　キラル光物性　多孔性分子結晶　凝集誘起発光　金属ナノ粒子　円偏光発光　円二色性

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

１．研究開始当初の背景

近年，分子系や分子集合系の非対称性に基づく科学は幅広い研究分野で進展しており，光物性，触媒反応，分子認識など様々な機能に関する研究が進められている。その中でもキラル光物性や不斉触媒反応は，社会的関心も高く，研究の発展が期待されており，本新学術領域「配位アシンメトリー」はその重要課題に取り組む研究領域である。本研究課題では，独自の理論を基盤として，複雑・複合系に適用できる電子状態理論を進展させ，様々な超分子系のキラル光物性や触媒反応を研究した。本新学術領域の実験研究者と協力し，キラル光物性や触媒反応に関わる新しい基礎学理「配位アシンメトリー」を創出し，新しい物質科学を拓くことを目的とした。

２．研究の目的

本研究課題では，複雑系の非対称性を記述するキラル基礎理論を開発し，理論・計算化学に基づいて「配位アシンメトリー」に関する基礎研究を実施することを目的とした。具体的には下記に示す複数の研究課題について研究を実施した。

(1)複雑系キラル基礎理論の開発とキラル光物性増幅の理論設計

(2)多孔性分子結晶 MMF の特異的触媒反応の反応機構

(3)白金錯体のリン光発光および凝集誘起発光の熱耐性

(4)銀ナノクラスターの構造と電子状態およびキラル光物性

これらの研究では実験研究者との共同研究を中心として推進し，分子の非対称性に関わる様々な化学事象の理論解析や分子設計を実施することを目的とした。

３．研究の方法

(1)複雑系キラル基礎理論の開発とキラル光物性増幅の理論設計

キラル分子に特徴的な光物性に円二色性（Circular Dichroism）や円偏光発光（Circular Polarized Luminescence）がある。複雑分子系・分子集合系におけるキラル光物性を解析する方法を開発し，分子系や分子集合系に応用した。フレンケル励起子分割解析法(Frenkel-Exciton Decomposition Analysis, FEDA)は，分子や分子集合系全体の光物性を，その部分系の光物性で表現する方法である。この励起子結合法を用いて旋光強度の構造的および物理的起源を解析する方法を開発した。さらに，逆設計理論と励起子結合法を融合した量子逆設計理論を開発した。この方法は，光物性の機能空間を探索することによって，光物性を最適化（最大化）する方法である。この方法を一次元の分子集合系に適用した。

(2)多孔性分子結晶 MMF の特異的触媒反応の反応機構

金属錯体で構成される多孔性結晶は PCP や MOF 等多く開発されている。しかし，多孔性分子結晶の空間特性を用いて反応を制御した例は少ない。本研究領域 A01 塩谷グループでは，細孔表面に十種類の認識サイトをもつ多孔性分子結晶(Metal Macrocycle Framework, MMF)を開発し，様々な特異的な吸着や反応が見出されている。最近，この MMF 中で光照射によって，選択的にオレフィン移動反応が進行することが見出された。本研究では，実験と協力し，この選択的光反応のメカニズムを理論計算により解析した。理論計算では，強相関電子系を解析する多配置電子相関理論や大規模系に適用できる ONIOM 法を適用した。

(3)白金錯体のリン光発光および凝集誘起発光の熱耐性

本研究領域 A02 直田グループでは，ヘテロ芳香環配位子を有する Pt 錯体のリン光発光や，嵩高い配位子を有する vaulted（天蓋）Pt 錯体の凝集誘起発光(Aggregation Induced Emission)およびその熱耐性が観測された。本研究では，①Pt 錯体のリン光発光および無輻射失活の機構とヘテロ芳香環配位子の関係，②天蓋 Pt 錯体の結晶における凝集誘起発光の起源および結晶構造における Pt-Pt 相互作用の関係について，密度汎関数理論や ONIOM 法を用いて，基礎研究を実施した。

(4)銀ナノクラスターの構造と電子状態およびキラル光物性

金属ナノ粒子の非対称性は，局在表面プラズモンによるキラル光物性増強など新規な機能発現への展開が期待できる。最近，本研究領域 A04 中嶋グループでは，実験的に不斉配位子で修飾した銀ナノクラスターのエナンチオ過剰誘導が成功し，キラル光物性を観測した。この銀ナノクラスターの光学活性の起源を解明するため，銀ナノクラスターの電子構造と光物性について密度汎関数理論に基づく理論研究を実施した。

4. 研究成果

(1)複雑系キラル基礎理論の開発とキラル光物性増幅の理論設計

①フレンケル励起子分割解析法(FEDA)の開発と色素分子への応用:キラル分子に特徴的な光物性である CD や CPL について，励起子結合法を用いて旋光強度の構造的および物理的起源を解析する方法を開発した。本方法は多数の色素群から構成される複雑・複合系の CD や CPL スペクトルの分割解析が可能であり，分子設計に有用である。この方法を最近開発されたキラル高分子の部分構造に適用し，その CD・CPL スペクトルを解析した。三量体の吸収・CD スペクトルを図 1 に示す。色素全体の計算(Full)と励起子結合法(EC)の結果はほぼ一致する。CD スペクトルでは隣り合う色素ユニット間の電気遷移双極子能率間の相互作用が支配的である結果が得られた。

②FEDA 法に基づく多発色団系の光物性を向上させる理論設計:近年の実験技術の進歩により，超分子・高分子系の設計には大きな自由度が与えられている。しかし，効率的な光学材料を開発するためには，適切な設計指針を示す必要がある。本研究では，超分子系の構成要素の寄与を明らかにする FEDA を開発し，多発色団系の発光および CPL を向上させる設計を行った。ここでは 2,5-ジフェニル-1,4-ジスチリルベンゼンのアキラル結晶(trans-DPDSB)の発光と CPL の生成・消滅機構を解析した。発光は弱い励起子結合による単一発色団内の局所遷移が主要因であることを示した。また，強い強度を持つ CPL 成分は，発色団とその隣接モノマー間の励起子電気遷移双極子モーメントの相互作用に由来し，アキラル系のエナンチオマーペアで互いに打ち消されることを示した。これらの知見に基づき，trans-DPDSB 結晶の CPL 増幅の指針を図 2 のとおり提案した。

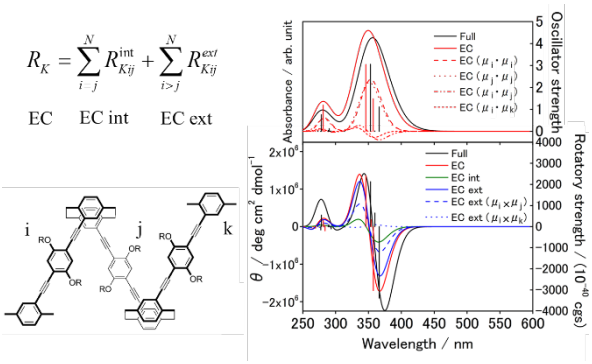

図1. 色素三量体モデルと EC 法による吸収・CD スペクトル

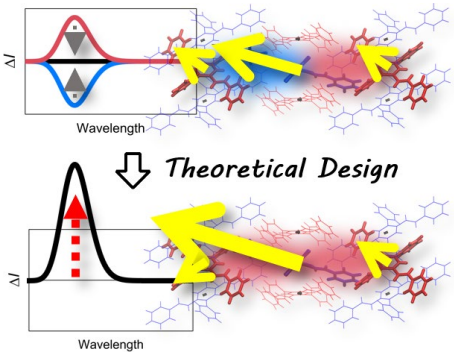

図 2. trans-DPDSB 結晶の CPL 増幅の理論設計

③量子逆設計理論の開発と一次元分子集合系の理論設計:分子集合体の光学物性は，分子組成と集合体の構造により大きく変化することが知られており，新奇光学物質の開発を目指して，様々な分子集合体が開発されている。研究開発においては，光機能—構造の関係の解明と設計指針が必要とされる。光学物性の計算の逆問題に基づく光機能性分子集合体の設計法を開発した。本方法は，候補分子集合体を表すハミルトニアンを導入し，全探索が困難である莫大な候補分子集合体群において最適化による合理的かつ効率的な設計を可能にした。この方法を複数の候補分子種と候補空間配置をもつ一次元分子集合体の設計に適用し，強い光吸収・CD をもつ集合体の分子組成・構造を提案した。また，適切な分子集合体の設計・形成と構成分子数の増大により，非線形的に CD を増大できることを明らかにした。高度な光機能を創出するための設計法を提案し，精密な分子種・分子配向制御が重要であることを示した。

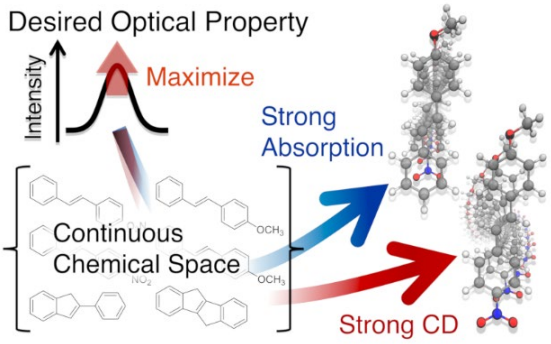

図 3. 量子逆設計理論による一次元分子集合体の光物性に関する構造体の設計

(2)多孔性分子結晶 MMF の特異的触媒反応の反応機構

これまで多様な多孔性分子結晶が開発されてきた。しかし，多孔性分子結晶の空間特性を用いて反応を制御した例は多くない。最近，細孔表面に十種類の認識ポケットをもつ多孔性分子結晶 Metal-Macrocycle Framework (MMF)が開発された(図 4(左))。さらにこの MMF 中で光照射によって，溶液中とは異なる選択的にオレフィン移動反応が進行することが見出された(図 4(右))。

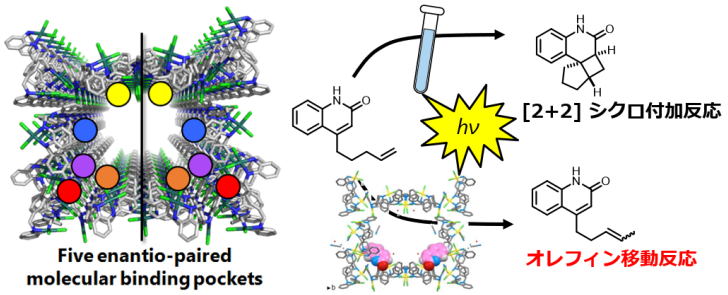

図 4. 十種類の認識ポケットをもつ多孔性分子結晶 MMF(左)と選択的に進行するオレフィン移動反応(右)

本研究では，この選択的光反応のメカニズムを理論計算と実験により検討した。実験では，300，400 nm 付近に強い吸収が観測されるが，理論計算(MS-CASPT2 計算)からこれらは S_1 および S_4 への励起であり，光励起によって Pd-Cl 結合解離が起こり Pd 活性種が生成することを示した。MMF 中のオレフィン移動反応については，ONIOM 法(DFT:PM6) (図 5 左)を用いていくつかの反応経路を検討し，反応機構を提案した(図 5 右)。Pd-H 種にアルキル基の付加がおこり，異性化反応が進行する。この反応機構によるエネルギープロファイルを計算し(図 5 右)，重水素化実験の結果を説明する反応機構の全容を解明した。

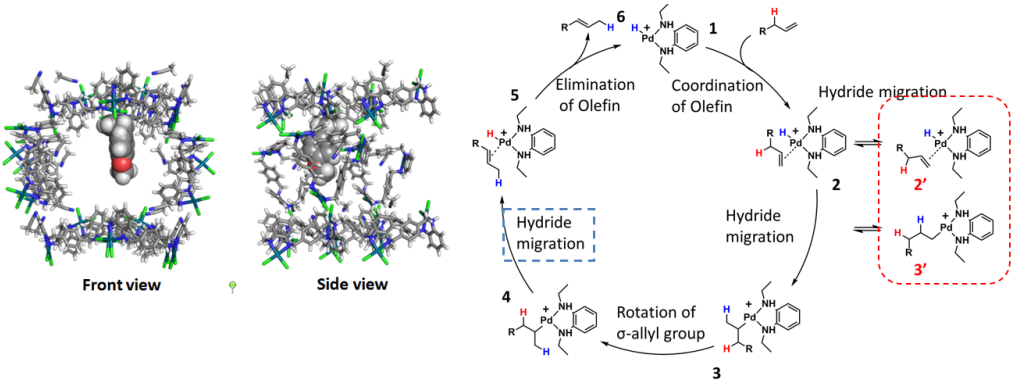

図 5. MMF モデル系による Pd-Cl 活性化(左)およびオレフィン移動反応の反応機構(右)

(3)白金錯体のリン光発光および凝集誘起発光の熱耐性

①Pt 錯体のリン光発光の熱耐性とヘテロ環の芳香族性の相関:ヘテロ環配位子を有する Pt 錯体は，金属－配位子電荷移動励起状態(^{3}MLCT)から強いリン光発光を示す。本研究では，共役長の異なるヘテロ環配位子を有する 4 種類の Pt 錯体を設計・合成し，77K において高い量子収率で強いリン発光を示すことを見出した。一部の錯体では高温で消光するが，無輻射失活は ^{3}MLCT の反応面から最低エネルギー交差点(MECP)を経由して基底状態への緩和であることを理論的に明らかにした(図 6 左)。さらに，リン光発光の熱耐性は，^{3}MLCT の安定構造と MECP のエネルギー差に相関することを示した。また，MECP の相対エネルギー位置は Pt dσ*軌道が配位子のπ*軌道と相互作用する強さによることを示し，発光強度およびその熱耐性は配位子のヘテロ環の芳香族性により制御できることを明らかにした(図 6 右)。

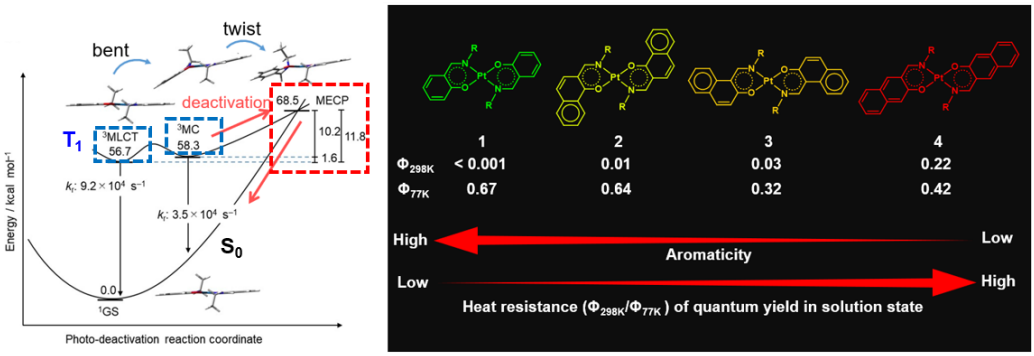

図 6. Pt 錯体のリン光発光の無輻射失活の経路(左)と量子収率の熱耐性とヘテロ環の芳香族性の相関(右)

②立体効果がある天蓋 Pt 錯体の凝集誘起発光:金属錯体結晶の凝集誘起発光(AIE)は，様々な光機能性材料を開発する上で重要な課題である。これまで数十年にわたり，AIE の発光機構およ

び消光機構が研究されてきたが，未だ完全には解明されていない。本研究では，AIE 活性である立体効果がある天蓋 Pt 錯体(図 7 左)の結晶状態(図 7 中央)におけるリン光発光と消光の電子過程を，理論と実験に基づいて研究した。これらの Pt 錯体は，結晶状態で金属-リガンド間の電荷移動励起状態からのリン発光を示すが，構造によって発光の熱耐性が異なる。結晶構造による構造緩和の制限から AIE 発現の機構を解明した(図 7 右)。また熱耐性の特性が，S_0 状態と T_1 状態の最小エネルギー交差点(MECP)の位置と極めて良く相関することを示した。さらに，2 つの理論モデルの結果を比較することで，AIE における Pt-Pt 相互作用の役割を明らかにした。

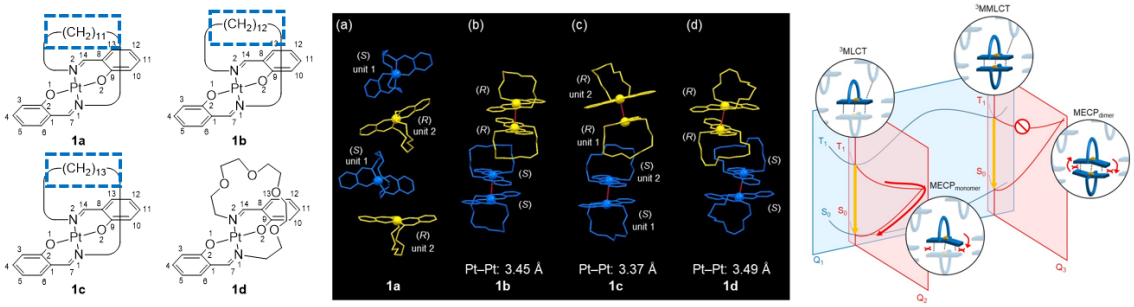

図 7. 立体効果がある Pt 錯体(左)，結晶構造(中央)，Pt-Pt 相互作用による励起状態の無輻射失活の経路(右)：Pt-Pt 相互作用が強い場合は構造緩和が阻害され無輻射失活が起きない.

(4)銀ナノクラスターの構造と電子状態およびキラル光物性

金属ナノ粒子の非対称性は，局在表面プラズモンによるキラル光物性増強など新規な機能発現への展開が期待できる。最近，実験的に不斉配位子で修飾した銀ナノクラスターのエナンチオ過剰誘導が成功し，キラル光物性が観測された(図 8)。この光学活性の起源を解明するため，銀ナノクラスターの電子構造と光学物性について密度汎関数法に基づく理論研究を実施した。その結果，クラスターのコアが超原子の閉殻電子構造をとり安定であること(図 9 左)，円二色性の起源が銀ナノクラスターのヘリカルな構造の電子状態を反映した金属－配位子電荷移動励起(図 9 右)であることを理論的に解明した。

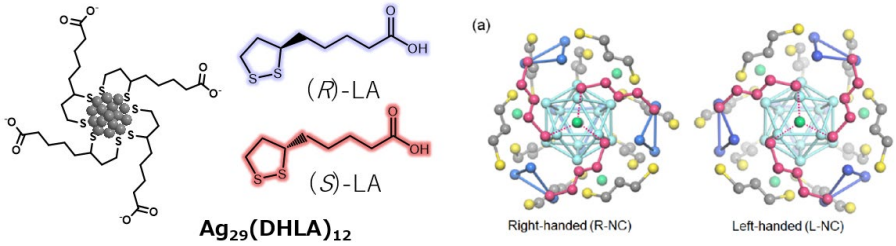

図 8. 銀ナノクラスターの分子構造(左)およびキラル光物性を示すヘリカルな構造(右)

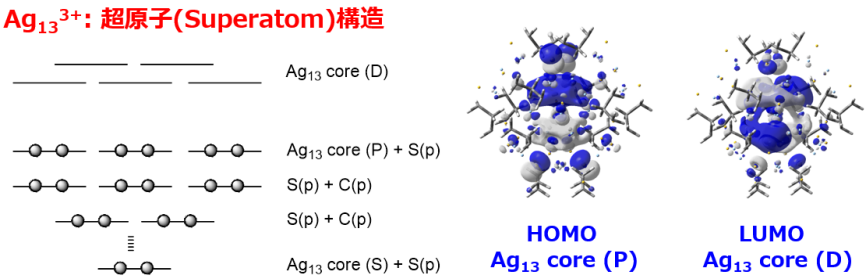

図 9. Ag_{13}^{3+}の超原子構造(左)および金属－配位子電荷移動励起に関わるフロンティア軌道(右)

まとめと謝辞

本研究課題では，複雑系の非対称性を記述するキラル基礎理論を開発し，理論・計算化学に基づいて「配位アシンメトリー」に関する基礎研究を実施した。実験研究者との共同研究を中心として推進し，分子の非対称性に関わる様々な化学事象の理論解析や分子設計を実施することができた。

本研究課題を通じて，大変お世話になりました領域代表の東京大学・塩谷光彦教授に感謝いたします。また，多くの共同研究の機会をいただきました共同研究者の先生方々に感謝いたします。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計41件（うち査読付論文　41件／うち国際共著　29件／うちオープンアクセス　11件）

１．著者名 S. Xu, M. Li, G. Pei, P. Zhao, X. Zhao, G. Wu, C. Kong, Z. Yang, M. Ehara, T. Yang	４．巻 125
２．論文標題 Stabilities, Electronic Structures, and Bonding Properties of 20-Electron Transition Metal Complexes (Cp)2TMO and their One-Dimensional Sandwich Molecular Wires (Cp = C5H5, C5(CH3)H4, C5(CH3)5; TM = Cr, Mo, W)	５．発行年 2021年
３．雑誌名 J. Phys. Chem. A	６．最初と最後の頁 721-730
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpca.0c07402	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 該当する

１．著者名 P. Zhao, B. Boekfa, K. Shimizu, M. Ogura, M. Ehara	４．巻 11
２．論文標題 Selective Catalytic Reduction of NO with NH3 over Cu-Exchanged CHA, GME, and AFX Zeolites: A DFT Study	５．発行年 2021年
３．雑誌名 Catal. Sci. Tech.	６．最初と最後の頁 1780-1790
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/d0cy02342f	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 該当する

１．著者名 J. U. Davis, Jr., Q.M. Phung, T. Yanai, M. Ehara, T. Sommerfeld	４．巻 125
２．論文標題 Lifetimes of Be32- and Mg32- Cluster Dianions	５．発行年 2021年
３．雑誌名 J. Phys. Chem. A	６．最初と最後の頁 3579-3588
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpca.1c00770	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 該当する

１．著者名 W. Ishii, S. Katao, Y. Nishikawa, Y. Okajima, A. Hatori, M. Ehara, T. Kawai, T. Nakashima	４．巻 57
２．論文標題 The Emergence of Intense Near-infrared Photoluminescence by Photoactivation of Silver Nanoclusters	５．発行年 2021年
３．雑誌名 Chem. Commun.	６．最初と最後の頁 6483-6486
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/D1CC02119B	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 A. Junkaew, M. Ehara, L. Huang, S. Namuangruk	4．巻 623
2．論文標題 Facet-Dependent Catalytic Activity of Anatase TiO2 for the Selective Catalytic Reduction of NO with NH3: A Dispersion-Corrected Density Functional Theory Study	5．発行年 2021年
3．雑誌名 Appl. Catal. A	6．最初と最後の頁 118250
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.apcata.2021.118250	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 該当する

1．著者名 R. Inoue, T. Naota, M. Ehara	4．巻 16
2．論文標題 Origin of the Aggregation‐Induced Phosphorescence of Platinum(II) Complexes: The Role of Metal-Metal Interactions on Emission Decay in the Crystalline State	5．発行年 2021年
3．雑誌名 Chem. Asian J. (Front Cover)	6．最初と最後の頁 3129-3140
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/asia.202100887	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 S. Kinoshita, Y. Harabuchi, Y. Inokuchi, S. Maeda, M. Ehara, K. Yamazaki, T. Ebata	4．巻 23
2．論文標題 Substitution Effect on the Nonradiative Decay and trans → cis Photoisomerization route: A Guideline to Develop Efficient Cinnamate Based Sunscreens	5．発行年 2021年
3．雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6．最初と最後の頁 834-845
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/D0CP04402D	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. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya	4．巻 16
2．論文標題 Mechanistic Studies on Photoinduced Catalytic Olefin Migration Reactions at the Pd(II) Centers of a Porous Crystal, Metal‐Macrocycle Framework	5．発行年 2021年
3．雑誌名 Chem. Asian J. (Front Cover)	6．最初と最後の頁 202-206
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/asia.202001306	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 G. Pei, P. Zhao, S. Xu, X. Zhao, C. Kong, Z. Yang, M. Ehara, T. Yang	4．巻 9
2．論文標題 Stabilities, Electronic Structures and Bonding Properties of Iron Complexes (E1E2)Fe(CO)2(CNArTripp2)2 (E1E2=BF, CO, N2, CN-, or NO+)	5．発行年 2020年
3．雑誌名 ChemistryOpen	6．最初と最後の頁 1195-1201
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/open.202000248	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 該当する

1．著者名 R. Nag, R. Curik, M. Tarana, M. Polasek, M. Ehara, T. Sommerfeld, J. Fedor	4．巻 22
2．論文標題 Resonant States in Cyanogen NCCN	5．発行年 2020年
3．雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6．最初と最後の頁 23141-23147
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/D0CP03333B	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 該当する

1．著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara	4．巻 124
2．論文標題 Theoretical Design of Photofunctional Molecular Aggregates for Optical Properties: An Inverse Design Approach	5．発行年 2020年
3．雑誌名 J. Phys. Chem. C	6．最初と最後の頁 13329-13337
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcc.0c01730	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 H. Yoshida, J. Kumar, M. Ehara, Y. Okajima, F. Asanoma, T. Kawai, T. Nakashima	4．巻 93
2．論文標題 Impact of Enantiomeric Ligand Composition on the Photophysical Properties of Chiral Ag29 Nanoclusters	5．発行年 2020年
3．雑誌名 Bull. Chem. Soc. Jpn. (Selected Paper)	6．最初と最後の頁 834-840
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1246/bcsj.20200089	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 該当する

1．著者名 Q. M. Phung, Y. Komori, T. Yanai, T. Sommerfeld, M. Ehara	4．巻 16
2．論文標題 Combination of a Voronoi-type Complex Absorbing Potential with the XMS-CASPT2 Method and Pilot Applications	5．発行年 2020年
3．雑誌名 J. Chem. Theory Comput	6．最初と最後の頁 2606-2616
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jctc.9b01032	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 該当する

1．著者名 M. Promkatkaew, S. Suramitr, T. Karpkird, M. Ehara, S. Hannongbua	4．巻 222
2．論文標題 DFT/TD-DFT Investigation on the Photoinduced Electron Transfer of Diruthenium and Viologen Complexes	5．発行年 2020年
3．雑誌名 J. Lumin.	6．最初と最後の頁 117121-1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jlumin.2020.117121	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 該当する

1．著者名 T. Sadhukhan, A. Junkaew, P. Zhao, H. Miura, T. Shishido, M. Ehara	4．巻 39
2．論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst	5．発行年 2020年
3．雑誌名 Organometallics	6．最初と最後の頁 528-537
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.organomet.9b00745	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 該当する

1．著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima	4．巻 11
2．論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality	5．発行年 2020年
3．雑誌名 Chem. Sci.	6．最初と最後の頁 2394-2400
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/c9sc05299b	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 該当する

1．著者名 P. Zhao, B. Boekfa, T. Nishitoba, N. Tsunoji, T. Sano, T. Yokoi, M. Ogura, M. Ehara	4．巻 294
2．論文標題 Theoretical Study on 31P NMR Chemical Shifts of Phosphorus-Modified CHA Zeolites	5．発行年 2020年
3．雑誌名 Micropor. Mesopor. Mat. (Selected Paper)	6．最初と最後の頁 109908
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.micromeso.2019.109908	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 該当する

1．著者名 T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara	4．巻 11
2．論文標題 Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation	5．発行年 2020年
3．雑誌名 Chem. Sci.	6．最初と最後の頁 113-125
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/c9sc04720d	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 該当する

1．著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara	4．巻 3
2．論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines	5．発行年 2019年
3．雑誌名 ChemPhotoChem	6．最初と最後の頁 707-718
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cptc.201900064	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 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara	4．巻 9
2．論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes	5．発行年 2019年
3．雑誌名 RSC Adv.	6．最初と最後の頁 13998-14003
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/c9ra02183c	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 該当する

1．著者名 M. Suda, Y. Thathong, V. Promarak, H. Kojima, M. Nakamura, T. Shiraogawa, M. Ehara, H. M. Yamamoto	4．巻 10
2．論文標題 Light-Driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters	5．発行年 2019年
3．雑誌名 Nature Commun.	6．最初と最後の頁 2455
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41467-019-10423-6	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 該当する

1．著者名 S. Kinoshita, Y. Inokuchi, Y. Onitsuka, H. Kohguchi, N. Akai, T. Shiraogawa, M. Ehara, K. Yamazaki, Y. Harabuchi, S. Maeda, T. Ebata	4．巻 21
2．論文標題 The Direct Observation of the Doorway 1nπ* State of Methylcinnamate and Hydrogen-Bonding Effects on the Photochemistry of Cinnamate-Based Sunscreens	5．発行年 2019年
3．雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6．最初と最後の頁 19755-19763
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/C9CP02914A	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 P. Zhao, Y. Maeda, M. Ehara	4．巻 123
2．論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory	5．発行年 2019年
3．雑誌名 J. Phys Chem. C	6．最初と最後の頁 18629-18637
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcc.9b03655	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 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota	4．巻 25
2．論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans‐Bis[β‐(Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d-π Conjugation	5．発行年 2019年
3．雑誌名 Chem. Eur. J	6．最初と最後の頁 3650-3661
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/chem.201805785	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 M. Ehara, U. Deva Priyakumar	4．巻 19
2．論文標題 Gold-Palladium Nanocluster Catalysts for Homocoupling: Electronic Structure and Interface Dynamics	5．発行年 2019年
3．雑誌名 Chem. Rec.	6．最初と最後の頁 947-959
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/tcr.201800177	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 該当する

1．著者名 Y. Maeda, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, M. Ehara, S. Nagase	4．巻 10
2．論文標題 Control of Near Infrared Photoluminescence Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes by Functionalization with Dendrons	5．発行年 2018年
3．雑誌名 Nanoscale	6．最初と最後の頁 23012-23017
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/c8nr07983h	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 該当する

1．著者名 P. Hirunsit, T. Toyao, S. M. A. H. Siddiki, K. Shimizu, M. Ehara	4．巻 19
2．論文標題 Origin of Nb2O5 Lewis Acid Catalysis for Activation of Carboxylic Acids in the Presence of Hard Base	5．発行年 2018年
3．雑誌名 ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)	6．最初と最後の頁 2848-2857
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cphc.201800723	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 該当する

1．著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara	4．巻 40
2．論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study	5．発行年 2018年
3．雑誌名 J. Comput. Chem.	6．最初と最後の頁 127-134
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/jcc.25553	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 該当する

1．著者名 A. Junkaew, S. Namuangruk, P. Maitarad, M. Ehara	4．巻 8
2．論文標題 Silicon-Coordinated Nitrogen-Doped Graphene as a Promising Metal-Free Catalyst for N2O Reduction by CO: A Theoretical Study	5．発行年 2018年
3．雑誌名 RSC Adv.	6．最初と最後の頁 22322-22330
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/c8ra03265c	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 該当する

1．著者名 T. Iwasaki, A. Fukuoka, W. Yokoyama, X. Min, I. Hisaki, T. Yang, M. Ehara, H. Kuniyasu, N. Kambe	4．巻 9
2．論文標題 Nickel-Catalyzed Coupling Reaction of Alkyl Halides with Aryl Grignard Reagents in the Presence of 1,3-Butadiene: Mechanistic Studies of Four-Component Coupling and Competing Cross-Coupling Reactions	5．発行年 2018年
3．雑誌名 Chem. Sci.	6．最初と最後の頁 2195-2211
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/C7SC04675H	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 該当する

1．著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara	4．巻 122
2．論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water	5．発行年 2018年
3．雑誌名 J. Phys. Chem. A.	6．最初と最後の頁 2580-2586
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpca.7b12669	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 該当する

1．著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci	4．巻 39
2．論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems	5．発行年 2018年
3．雑誌名 J. Comput. Chem.	6．最初と最後の頁 931-935
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/jcc.25169	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 該当する

1．著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, P. Hamal, M. Ehara	4．巻 13
2．論文標題 Resonance Energies and Lifetimes from the Analytic Continuation of the Coupling Constant Method: Robust Algorithms and a Critical Analysis	5．発行年 2017年
3．雑誌名 J. Chem. Theory Comput.	6．最初と最後の頁 2550-2560
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jctc.6b01228	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 該当する

1．著者名 T. Yang, R. Fukuda, R. Cammi, M. Ehara	4．巻 121
2．論文標題 Diels-Alder Cycloaddition of Cyclopentadiene and C60 at the Extreme High Pressure	5．発行年 2017年
3．雑誌名 J. Phys. Chem. A	6．最初と最後の頁 4363-4371
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpca.7b02805	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 該当する

1．著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara	4．巻 9
2．論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study	5．発行年 2017年
3．雑誌名 ChemCatChem	6．最初と最後の頁 4490-4500
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cctc.201700839	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 該当する

1．著者名 T. Yang, M. Ehara	4．巻 19
2．論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on γ-Al2O3 Surfaces Using First-Principles Calculations	5．発行年 2017年
3．雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6．最初と最後の頁 3679-3687
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/C6CP06785A	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. Yang, M. Ehara	4．巻 82
2．論文標題 Computational Studies on Reaction Mechanism and Origins of Selectivities in Ni-Catalyzed (2+2+2) Cycloadditions and Alkenylative Cyclizations of 1,6-Ene-Allenes and Alkenes	5．発行年 2017年
3．雑誌名 J. Org. Chem.	6．最初と最後の頁 2150-2159
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.joc.6b02957	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 M. Savarese, U. Raucci, R. Fukuda, C. Adamo, M. Ehara, N. Rega, I. Ciofini	4．巻 38
2．論文標題 Comparing the Performance of TD-DFT and SAC-CI Methods in the Description of Excited States Potential Energy Surface: an Excited State Proton Transfer Reaction as Case Study	5．発行年 2017年
3．雑誌名 J. Comput. Chem	6．最初と最後の頁 1084-1092
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/jcc.24780	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 該当する

1．著者名 T. Yang, R. Fukuda, S. Hosokawa, T. Tanaka, S. Sakaki, M. Ehara	4．巻 9
2．論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/γ-Al2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni)	5．発行年 2017年
3．雑誌名 ChemCatChem	6．最初と最後の頁 1222-1229
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cctc.201601713	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 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl	4．巻 19
2．論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes	5．発行年 2016年
3．雑誌名 ChemPhysChem	6．最初と最後の頁 3010-3022
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cphc.201600633	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 該当する

1．著者名 A. Gupta, B. Boekfa, H. Sakurai, M. Ehara, U. Deva Priyakumar	4．巻 120
2．論文標題 Structure, Interaction, and Dynamics of Au/Pd Bimetallic Nanoalloys Dispersed in Aqueous Ethylpyrrolidone, a Monomeric Moiety of Polyvinylpyrrolidone	5．発行年 2016年
3．雑誌名 J. Phys. Chem. C	6．最初と最後の頁 17454-17464
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcc.6b05097	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 該当する

〔学会発表〕　計36件（うち招待講演　36件／うち国際学会　27件）

1．発表者名 M. Ehara
2．発表標題 Theoretical Chemistry for Complex Systems: Pd-Au Nanocluster and Heterogeneous Catalysts
3．学会等名 Pacifichem 2021: Symposium (#393) Triangle of Heterogeneous Catalysis, Surface Science, and Theory（招待講演）（国際学会）
4．発表年 2021年

1．発表者名 M. Ehara
2．発表標題 Theoretical Chemistry for Complex Systems: Nanocluster and Heterogeneous Catalysts
3．学会等名 The 2nd IMS-SKKU-UJN symposium on Molecular Science（招待講演）（国際学会）
4．発表年 2021年

1．発表者名 M. Ehara
2．発表標題 Theoretical Studies on Heterogeneous and Nanocluster Catalysts: Collaborations with Experiment
3．学会等名 The 8th International Symposium of Institute for Catalysis: Novel Approaches for Next Generation Catalysis（招待講演）（国際学会）
4．発表年 2021年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Theoretical Design of Photofunctional Molecular Aggregates for Optical Properties: An Inverse Design Approach
３．学会等名 Japan-Norway Bilateral Symposium from Fundamental Chemistry to Porous Materials: Theory and Experiment（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2020年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 不均一系触媒の構造と機能に関する理論研究
３．学会等名 第126回触媒討論会「コンピューターの利用」（招待講演）
４．発表年 2020年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Theoretical Approaches for Coordination Asymmetry: Photoreaction in MMF and Chiroptical Spectroscopy
３．学会等名 Combination of Theoretical/Computational Studies and Experiments toward Porous Coordination Polymers/ Metal Organic Frameworks（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2019年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Coordination Asymmetry: Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems
３．学会等名 The 9th Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019)（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2019年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 合金微粒子触媒の構造と機能に関する理論研究
３．学会等名 触媒学会 若手会 第40回夏の研修会（招待講演）
４．発表年 2019年

１．発表者名 Masahiro Ehara
２．発表標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems
３．学会等名 Pure and Applied Chemistry International Conference 2019 (PACCON 2019)（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2019年

１．発表者名 Masahiro Ehara
２．発表標題 Element Strategy for Catalysts and Batteries
３．学会等名 SOKENDAI Asian Winter School, "Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basics to Advanced Researches"（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Masahiro Ehara
２．発表標題 Theoretical Approaches to Asymmetry: Photoreaction in MMF and Spectroscopy
３．学会等名 The 2nd International Symposium on Coordination Asymmetry（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Masahiro Ehara
２．発表標題 Wavefunction Theory for Photophysical Properties of Functional Molecules
３．学会等名 Japan-India Mini Workshop（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Masahiro Ehara
２．発表標題 Theoretical Chemistry for Complex Systems: Nanocluster and Heterogeneous Catalysts
３．学会等名 Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Masahiro Ehara
２．発表標題 Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI: Collaboration with ATR-FUV Spectroscopy
３．学会等名 International Conference on Advanced Molecular Spectroscopy（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Masahiro Ehara
２．発表標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems
３．学会等名 The 7th Japan-Czech-Slovak Symposium（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 光機能分子の励起状態に関する理論的研究
３．学会等名 第3回キラルルミネッセンスセミナー（招待講演）
４．発表年 2018年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 担持クラスター触媒の理論・計算化学
３．学会等名 第55回触媒研究懇談会（招待講演）
４．発表年 2018年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 複雑系の理論・計算化学：光機能分子への応用
３．学会等名 近畿大学 第14回光化学セミナー（招待講演）
４．発表年 2018年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 金属微粒子触媒の理論化学
３．学会等名 第４１回グリーンセミナー（招待講演）
４．発表年 2018年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Element Strategy for Catalysts and Batteries
３．学会等名 Shanghai University（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Theoretical Chemistry for Complex Systems: Approach from Accurate Electronic Structure Theory
３．学会等名 Fudan University（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Theoretical Chemistry for Complex Systems: Nanocluster and heterogeneous catalysts
３．学会等名 Forum for Molecular Science, Xi'an Jiaotong University（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Structure and Catalytic Activity of Nanocluster Catalysts
３．学会等名 The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21)（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Interface in Supported Nanocluster Catalysts
３．学会等名 First Joint Symposium of IMS-NANOTEC（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI
３．学会等名 The 2nd International Symposium on Quantum Chemistry at Kwansei Gakuin University（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI and ACCC SAC-CI
３．学会等名 The 8th Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry (APCTCC)（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 電子共鳴状態の理論研究
３．学会等名 第１１回分子科学討論会（招待講演）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara, T. Sommerfeld
２．発表標題 Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI and ACCC SAC-CI
３．学会等名 Recent Advances in Many-Electron Theory (RAMET) 2017（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Relevance of Interface Region in Supported Nanocluster Catalysts
３．学会等名 The 5th Modeling of Chemical and Biological Reactivity (MCBR-5)（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2017年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 紫外・遠紫外領域に観測される電子状態と分子間相互作用の理論的解析
３．学会等名 日本分光学会遠紫外分光部会 第2回講演会「拓かれる紫外・遠紫外分光法の研究領域」（招待講演）
４．発表年 2017年

１．発表者名 M. Ehara, T. Sommerfeld
２．発表標題 Recent Progress in CAP/SAC-CI Method for Locating Resonance States
３．学会等名 ISTCP IX 2016 Conference（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2016年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Recent Progress in PCM SAC-CI and CAP/SAC-CI
３．学会等名 Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2016)（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2016年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Relevance of Interface Region in Supported Nanocluster Catalysts
３．学会等名 EMN Meeting on Computation and Theory Energy Materials Nanotechnology（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2016年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Charge Transfer Excitations Studied by the SAC-CI Method
３．学会等名 Workshop: Excited States in Complex Systems (ESCS2016),（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2016年

１．発表者名 M. Ehara
２．発表標題 Recent Progress in PCM SAC-CI and CAP/SAC-CI
３．学会等名 The 15th Theoretical Chemistry Symposium (TCS)（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2016年

１．発表者名 江原正博
２．発表標題 触媒・電池元素戦略における理論研究のアプローチ
３．学会等名 CSJ化学フェスタ「触媒・電池の創造戦略～実験と理論計算科学のインタープレイ！」（招待講演）
４．発表年 2016年

〔図書〕　計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

自然科学研究機構　分子科学研究所　計算科学研究センター　江原研究室 http://tc.ims.ac.jp/

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

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			
米国	Southeastern Loussiana University			
フランス	Chimie ParisTech			
ドイツ	University of Marburg			
中国	Xi'an Jiaotong University			
インド	IIIT, Hyderabad			

共同研究相手国	相手方研究機関			
ドイツ	University of Marburg			
イタリア	University of Pisa			
タイ	Rajamangala University of Technology			
米国	University of Colorado			
イタリア	University of Naples			