#### 研究成果報告書 科学研究費助成事業

今和 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 に立て関する発展的研究に影響をにラールデバイフ関系や医療等に関するの分野に応用されることが期待できる 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 偏光発光 円二色性 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

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-ジフェニルー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。

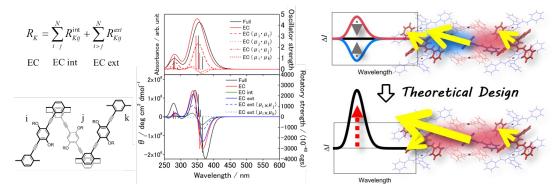


図1. 色素三量体モデルと EC 法による吸収・CD スペクトル 図 2. trans-DPDSB 結晶の CPL 増幅の理論設計

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。

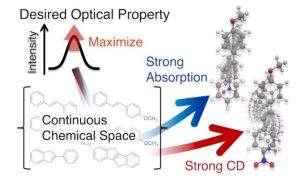


図3. 量子逆設計理論による一次元分子集合体の 光物性に関する構造体の設計

# (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))。

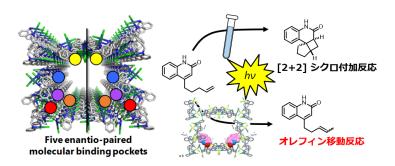


図 4. 十種類の認識ポケットをもつ多孔性分子結晶 MMF(左)と選択的に進行するオレフィン移動反応(右)

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。

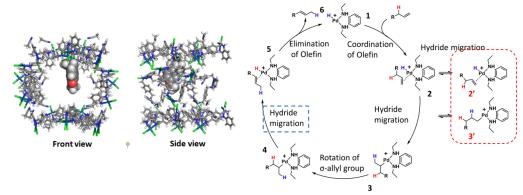


図 5. MMF モデル系による Pd-Cl 活性化(左)およびオレフィン移動反応の反応機構(右)

#### (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、金属一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 d  $\sigma$  \*軌道が配位子の $\sigma$  \*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)。

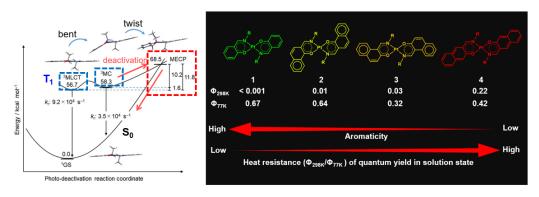


図 6. Pt 錯体のリン光発光の無輻射失活の経路(左)と量子収率の熱耐性とヘテロ環の芳香族性の相関(右) ②立体効果がある天蓋 Pt 錯体の凝集誘起発光: 金属錯体結晶の凝集誘起発光(AIE)は、様々な 光機能性材料を開発する上で重要な課題である。これまで数十年にわたり、AIE の発光機構およ

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、結晶状態で金属ー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。

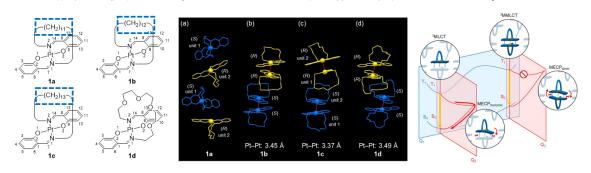


図 7. 立体効果がある Pt 錯体(左), 結晶構造(中央), Pt-Pt 相互作用による励起状態の無輻射失活の経路 (右):Pt-Pt 相互作用が強い場合は構造緩和が阻害され無輻射失活が起きない.

## (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。

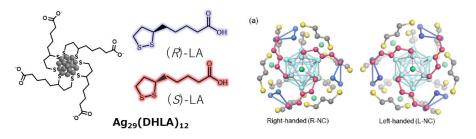


図 8. 銀ナノクラスターの分子構造(左)およびキラル光物性を示すヘリカルな構造(右)

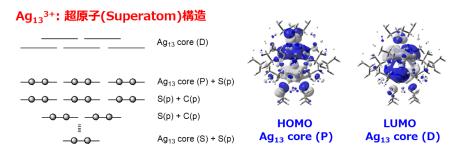


図 9. Ag133+の超原子構造(左)および金属 - 配位子電荷移動励起に関わるフロンティア軌道(右)

#### 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)

〔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	4.巻
S. Xu, M. Li, G. Pei, P. Zhao, X. Zhao, G. Wu, C. Kong, Z. Yang, M. Ehara, T. Yang	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	6 . 最初と最後の頁
J. Phys. Chem. A	721-730
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1021/acs.jpca.0c07402	有
オープンアクセス	国際共著
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	該当する
1 . 著者名 P. Zhao, B. Boekfa, K. Shimizu, M. Ogura, M. Ehara	4.巻
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	6.最初と最後の頁
Catal. Sci. Tech.	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
オーブンアクセス	国際共著
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	該当する
1 . 著者名	4. 巻
J. U. Davis, Jr., Q.M. Phung, T. Yanai, M. Ehara, T. Sommerfeld	125
2.論文標題	5 . 発行年
Lifetimes of Be32- and Mg32- Cluster Dianions	2021年
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Phys. Chem. A	3579-3588
掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 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	4.巻
W. Ishii, S. Katao, Y. Nishikawa, Y. Okajima, A. Hatori, M. Ehara, T. Kawai, T. Nakashima	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	6.最初と最後の頁
Chem. Commun.	6483-6486
掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 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

オープンアクセス 国際共著	後の頁
A. Junkaew, M. Ehara, L. Huang, S. Namuangruk 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  3.雑誌名 Appl. Catal. A 6.最初と最行 118250  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 10.1016/j.apcata.2021.118250	後の頁
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  3.雑誌名 Appl. Catal. A  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   国際共著	後の頁
Facet-Dependent Catalytic Activity of Anatase TiO2 for the Selective Catalytic Reduction of NO with NH3: A Dispersion-Corrected Density Functional Theory Study  3.雑誌名 Appl. Catal. A  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1016/j.apcata.2021.118250  国際共著	後の頁
Facet-Dependent Catalytic Activity of Anatase TiO2 for the Selective Catalytic Reduction of NO with NH3: A Dispersion-Corrected Density Functional Theory Study  3.雑誌名 Appl. Catal. A  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1016/j.apcata.2021.118250  approximately and the Selective Catalytic Reduction of NO 2021年  10.201年  10.2021年  10.	後の頁
with NH3: A Dispersion-Corrected Density Functional Theory Study 3.雑誌名 Appl. Catal. A  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  国際共著	後の頁
3.雑誌名 Appl. Catal. A6.最初と最行 118250掲載論文のDOI (デジタルオプジェクト識別子) 10.1016/j.apcata.2021.118250査読の有無オープンアクセス国際共著	後の頁
3.雑誌名 Appl. Catal. A6.最初と最行 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査読の有無オープンアクセス国際共著	後の頁
Appl. Catal. A118250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査読の有無オープンアクセス国際共著	X 0 7 PK
掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1016/j.apcata.2021.118250 オープンアクセス 国際共著	
10.1016/j.apcata.2021.118250 オープンアクセス 国際共著	
10.1016/j.apcata.2021.118250 オープンアクセス 国際共著	
10.1016/j.apcata.2021.118250 オープンアクセス 国際共著	
オープンアクセス 国際共著	
オープンアクセス 国際共著	有
	13
	l/ <del>→</del> ¬
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該当	当する
1.著者名	
R. Inoue, T. Naota, M. Ehara	
N. Houc, T. Naota, W. Lilata	
2	
2.論文標題 5.発行年	
Origin of the Aggregation Induced Phosphorescence of Platinum(II) Complexes: The Role of 2021年	
Metal-Metal Interactions on Emission Decay in the Crystalline State	
3.雑誌名 6.最初と最	後の百
	XVX
Chem. Asian J. (Front Cover) 3129-3140	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無	
	有
10.1002/4314.202100007	Ħ
オープンアクセス 国際共著	
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	-
1. 著者名 4. 巻	
S. Kinoshita, Y. Harabuchi, Y. Inokuchi, S. Maeda, M. Ehara, K. Yamazaki, T. Ebata 23	
2 . 論文標題	
Substitution Effect on the Nonradiative Decay and trans cis Photoisomerization route: A 2021年	
Guideline to Develop Efficient Cinnamate Based Sunscreens	
3.雑誌名 6.最初と最	4の百
	を の 兵
Phys. Chem. Chem. Phys. 834-845	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無	
	有
10.1039/D0CP04402D	
	13
オープンアクセス 国際共著	
	-
オープンアクセス 国際共著	-
オープンアクセス 国際共著 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	-
オープンアクセス       国際共著         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       4.巻	-
オープンアクセス 国際共著 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	-
オープンアクセス 国際共著  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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  4 . 巻 16	-
オープンアクセス 国際共著  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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  4 . 巻 16	-
オープンアクセス 国際共著  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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  2 . 論文標題  5 . 発行年	-
オープンアクセス 国際共著  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  2 . 論文標題 Mechanistic Studies on Photoinduced Catalytic Olefin Migration Reactions at the Pd(II) Centers 2021年	-
オープンアクセス 国際共著 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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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	-
オープンアクセス 国際共著  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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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  3 . 雑誌名  6 . 最初と最	-
オープンアクセス 国際共著 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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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	-
オープンアクセス 国際共著  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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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  3 . 雑誌名  6 . 最初と最	-
オープンアクセス 国際共著  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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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  3 . 雑誌名  6 . 最初と最	-
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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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  3 . 雑誌名 Chem. Asian J. (Front Cover)	-
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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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  3 . 雑誌名 Chem. Asian J. (Front Cover)  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子)  査読の有無	- 歩の頁
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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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  3 . 雑誌名 Chem. Asian J. (Front Cover)  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子)  査読の有無	-
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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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  3 . 雑誌名 Chem. Asian J. (Front Cover)  おも、最初と最行とのでは、 のののでは、できない。というでは、これには、これには、これには、これには、これには、これには、これには、これに	- 歩の頁
オープンアクセス 国際共著  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  1 . 著者名 H. Yonezawa, T. Shiraogawa, M. Han, S. Tashiro, M. Ehara, M. Shionoya  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  3 . 雑誌名 Chem. Asian J. (Front Cover)  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  査読の有無	- 歩の頁

1.著者名	4 . 巻
G. Pei, P. Zhao, S. Xu, X. Zhao, C. Kong, Z. Yang, M. Ehara, T. Yang	9
o *A->	F 38.7= /=
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
	C = 171 = 14 o =
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
ChemistryOpen	1195-1201
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	   査読の有無
10.1002/open.202000248	有
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	該当する
4	1 <del>1''</del>
1 . 著者名   R. Nag, R. Curik, M. Tarana, M. Polasek, M. Ehara, T. Sommerfeld, J. Fedor	4.巻 22
	5.発行年
Resonant States in Cyanogen NCCN	2020年
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Phys. Chem. Chem. Phys.	23141-23147
<u></u>   掲載論文のDOI ( デジタルオプジェクト識別子 )	   査読の有無
拘車に開文のDOT ( アンタルオフシェクト減別于 )	直硫の有無
ナーデンファセフ	<b>国際共革</b>
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	4 . 巻
T. Shiraogawa, M. Ehara	124
2.論文標題	5.発行年
Theoretical Design of Photofunctional Molecular Aggregates for Optical Properties: An Inverse Design Approach	2020年
3 . 雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Phys. Chem. C	13329-13337
   掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	   査読の有無
10.1021/acs.jpcc.0c01730	有
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスとしている (また、その予定である)	-
4 ***	1 4 24
1 . 著者名   H. Yoshida, J. Kumar, M. Ehara, Y. Okajima, F. Asanoma, T. Kawai, T. Nakashima	4.巻 93
	5.発行年
Z . 論文标題   Impact of Enantiomeric Ligand Composition on the Photophysical Properties of Chiral Ag29   Nanoclusters	2020年
3 . 雑誌名	6.最初と最後の頁
Bull. Chem. Soc. Jpn. (Selected Paper)	834-840
  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	   査読の有無
79取開来のDOT ( ) クラルオフラエット調劢(テ ) 10.1246/bcsj.20200089	有
   オープンアクセス	国際共著
   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	4 . 巻
Q. M. Phung, Y. Komori, T. Yanai, T. Sommerfeld, M. Ehara	16
2、 含金子 #爾爾	r 38/=/=
2.論文標題	5.発行年
Combination of a Voronoi-type Complex Absorbing Potential with the XMS-CASPT2 Method and Pilot	2020年
Applications	
3 . 雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Chem. Theory Comput	2606-2616
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1021/acs.jctc.9b01032	有
·	
オープンアクセス	国際共著
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	該当する
カープラックと人とはない、人はカープラックと人が、四種	政当りる
4 ***	4 44
1.著者名	4 . 巻
M. Promkatkaew, S. Suramitr, T. Karpkird, M. Ehara, S. Hannongbua	222
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
2. 論文標題	5.発行年
DFT/TD-DFT Investigation on the Photoinduced Electron Transfer of Diruthenium and Viologen	2020年
Complexes	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Lumin.	117121-1-9
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1016/j.jlumin.2020.117121	有
オープンアクセス	国際共著
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	該当する
	_
1. 著者名	4 . 巻
! • 14 日 日	7 . 6
T Cadhadahan A Isabanan D Zhao II Nisaa T Chiabida N Chara	20
T. Sadhukhan, A. Junkaew, P. Zhao, H. Miura, T. Shishido, M. Ehara	39
T. Sadhukhan, A. Junkaew, P. Zhao, H. Miura, T. Shishido, M. Ehara 2.論文標題	39 5 . 発行年
2.論文標題	5.発行年
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-	
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
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3. 雑誌名	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
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
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3.雑誌名	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3. 雑誌名 Organometallics	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3. 雑誌名	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3.雑誌名 Organometallics 掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子)	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3.雑誌名 Organometallics	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3. 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3. 雑誌名 Organometallics 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3. 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3. 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3. 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3. 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3. 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1. 著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2. 論文標題	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2.論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年
2. 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3. 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1. 著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2. 論文標題	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2.論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2.論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality  3.雑誌名	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年
2 . 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3 . 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1 . 著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2 . 論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality  3 . 雑誌名	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2.論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality  3.雑誌名 Chem. Sci.	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 2394-2400
2 . 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3 . 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1 . 著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2 . 論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality  3 . 雑誌名 Chem. Sci.	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 2394-2400
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2.論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality  3.雑誌名 Chem. Sci.	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 2394-2400
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2.論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality  3.雑誌名 Chem. Sci.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc05299b	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 2394-2400
2 . 論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst 3 . 雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1 . 著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2 . 論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality  3 . 雑誌名 Chem. Sci.	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 2394-2400
2.論文標題 Importance of the Pd and Surrounding Site in Hydrosilylation of Internal Alkynes by Palladium-Gold Alloy Catalyst  3.雑誌名 Organometallics  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00745  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  1.著者名 H. Yoshida, M. Ehara, U. Deva Priyakumar, T. Kawai, T. Nakashima  2.論文標題 Enantioseparation and Chiral Induction in Ag29 Nanoclusters with Intrinsic Chirality  3.雑誌名 Chem. Sci.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc05299b	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 528-537 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 11 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 2394-2400

P. Zhao, B. Boekfa, T. Nishitoba, N. Tsunoji, T. Sano, T. Yokoi, M. Ogura, M. Ehara         24           2. 論文措置 Theoretical Study on 31P NMR Chemical Shifts of Phosphorus-Modified CHA Zeolites         5. 飛行年 2000年           3. 終誌名 Micropor, Mescopor, Mat. (Selected Paper)         6. 是初と最後の頁 109908           掲載論文のDOI (デジタルオプジェクト編例子) 10.1016/j.microneso.2019.109908         直頭内無期 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)         国際共畜 該当する           1. 業者名 T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara         4. 急 1. 書名名 1. 書名名 1. 書名名 Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Nota-Selectivity of Pal/Norbornene-Catalyzed C-H Activation         5. 発行年 2020年 20		
P. Zhao, B. Boekfa, T. Nishitoba, N. Tsunoji, T. Sano, T. Yokoi, W. Ogura, M. Ehara         214           2. 論文標題 Theoretical Study on 31P NMR Chemical Shifts of Phosphorus-Modified CHA Zeolites         5. 発行年 2000年           3. 熱話名 Micropor. Mescopor. Mat. (Selected Paper)         6. 無初と最後の頁 109908           月報論文の001 (デジタルオブジェクト提例子) 10.1016/j.microneso.2019.109908         金銭の有無 有           オープンアクセス 7ープンアクセス         4. 巻 11           1. 蓄着名 1. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara         4. 巻 11           2. 論文標題 Beaction Nechanise, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of PU/Norbornene-Catalyzed C-H Activation         5. 発行年 2000年 2000年 2013年 2019年 2		4 . 巻
2 : 論文標題 Theoretical Study on 31P NMR Chemical Shifts of Phosphorus-Modified CRA Zeolites  5 . 発行年 2020年  3 . 縁誌名 Micropor . Mat. (Selected Paper)  (10:7016/jincicroneso.2019.109808  (10:7016/jincicroneso.2019.109808  (10:7016/jincicroneso.2019.109808  (10:7017/jincicroneso.2019.109808  (10:7017/jincicroneso.2019.109808  (10:7017/jincicroneso.2019.109808  (10:7017/jincicroneso.2019.109808  (10:7019/jincicroneso.2019.109808  (10:7019/		294
Theoretical Study on 31P NMR Chemical Shifts of Phosphorus-Modified CHA Zeolites 2020年  Micropor. Mesopor. Mat. (Selected Paper) 6. 最初と最後の頁 1099908 7. 1099908 2. 1099908 2. 1099908 2. 2. 第次標準 2. 1099908 2. 2. 第次課題 2. 第录课题 2. 第录题	1. Zhao, B. Bookra, T. Montroba, N. Todnoji, T. Odno, T. Tokor, W. Ogara, W. Zhara	20.
Theoretical Study on 31P NMR Chemical Shifts of Phosphorus-Modified CHA Zeolites 2020年  Micropor. Mesopor. Mat. (Selected Paper) 6. 最初と最後の頁 1099908 7. 1099908 2. 1099908 2. 1099908 2. 2. 第次標準 2. 1099908 2. 2. 第次課題 2. 第录课题 2. 第录题		
3 ・株誌名 Micropor、Mat. (Selected Paper)  5 ・最初と最後の頁 109908  6 ・最初と最後の頁 109908  7 ・	2 . 論文標題	5 . 発行年
3 ・株誌名 Micropor、Mat. (Selected Paper)  5 ・最初と最後の頁 109908  6 ・最初と最後の頁 109908  7 ・	Theoretical Study on 31P NMR Chemical Shifts of Phosphorus-Modified CHA Zeolites	2020年
Micropor. Mescopor. Mat. (Selected Paper)		
Micropor. Mescopor. Mat. (Selected Paper)	2 18-54-7	6 目初し目後の五
理験論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j_micromeso_2019.109908		
1. 著名名	Micropor. Mesopor. Mat. (Selected Paper)	109908
1. 著名名		
1. 著名名		
1. 著名名		*÷•≠
1 . 著名名 T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, M. Ehara  1 . 著名名 T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation 3 . MetaG2 Chem. Sci.  1 . 著名名 Chem. Sci.  2 . 論文信息 Chem. Sci.  3 . MetaG2 Chem. Sci.  4 . 差 T. Shiraogawa, M. Ehara  1 . 著名名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2 . 論文信題 Theoratical Study on the Optical Properties of Multichronophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3 . MetaG2 ChemPhotochem ChemPhotochem  4 . 差 T. T. Typ Pot Z Tープンアクセス Tーズンアクセス Tーズンアクセスではない、又はオープンアクセスが回難 T. 著名名 T. Mada, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara T. Shiraa Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes The Standard Carbon Nanotubes T		<b>宜読の有無</b>
Tame	10.1016/j.micromeso.2019.109908	有
Tame	,	
Tame	ナーゴンフクセフ	<b>国際共</b> 茎
1 . 著者名 T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara  1 . 著者名 T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation 3 . 雑誌名 Chem. Sci.  1 . 報義公のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04720d  カーブンアクセス  オーブンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2 . 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  おープンアクセス  「表者名 ChemPhotoChem  おープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難  1 . 著者名 オープンアクセス  国際共著 カープンアクセス  国際共著  イーブンアクセス  国際共著  ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・		
T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara  11 2. 論文標題 Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation 3. 雑誌名 Chem. Sci.  お記録なのの1(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04720d  1. 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  1. 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2. 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Nodification Guidelines 3. 雑誌名 ChemPhotoChem  おープンアクセス  相談論文の001(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  オープンアクセス  相談論文の001(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  オープンアクセス  コープンアクセス  コーグンアクセス  コーグンアクセスが困難  コーグンアクセス  コーグンアクセス  コーグンアクセスが困難  コーグンアクセス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクセス  コーグンアクロス	オープンアクセスとしている(また、その予定である)	該当する
T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara  11 2. 論文標題 Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation 3. 雑誌名 Chem. Sci.  お記録なのの1(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04720d  1. 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  1. 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2. 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Nodification Guidelines 3. 雑誌名 ChemPhotoChem  おープンアクセス  相談論文の001(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  オープンアクセス  相談論文の001(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  オープンアクセス  コープンアクセス  コーグンアクセス  コーグンアクセスが困難  コーグンアクセス  コーグンアクセス  コーグンアクセスが困難  コーグンアクセス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクセス  コーグンアクロス		
T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara  11 2. 論文標題 Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation 3. 雑誌名 Chem. Sci.  お記録なのの1(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04720d  1. 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  1. 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2. 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Nodification Guidelines 3. 雑誌名 ChemPhotoChem  おープンアクセス  相談論文の001(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  オープンアクセス  相談論文の001(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  オープンアクセス  コープンアクセス  コーグンアクセス  コーグンアクセスが困難  コーグンアクセス  コーグンアクセス  コーグンアクセスが困難  コーグンアクセス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクロス  コーグンアクセス  コーグンアクロス	1 英老夕	۸ <b>*</b>
2. 論文標題 Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of PO/Norbornene-Catalyzed C-H Activation 2020年 202		
Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation	T. Yang, C. Kong, S. Yang, Z. Yang, S. Yang, M. Ehara	11
Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation		
Reaction Mechanism, Norbornene and Ligand Effects, and Origins of Meta-Selectivity of Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation	2 論文趣頭	5 発行年
Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation   13.1486名   13.1486名   13.1486の頁   113.148   13.1		
3 . 雑誌名 Chem. Sci.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04720d  オーブンアクセス  オーブンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著名名 T. Shi raogawa, M. Ehara  2 . 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  おーブンアクセスではない、又はオーブンアクセスが困難  1 . 著名名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  1 . 著名名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single・Nal led Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv.  香読の有無 6 . 最初と最後の頁 13998-14003		2020年
3 . 雑誌名 Chem. Sci.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04720d  オーブンアクセス  オーブンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著名名 T. Shi raogawa, M. Ehara  2 . 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  おーブンアクセスではない、又はオーブンアクセスが困難  1 . 著名名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  1 . 著名名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single・Nal led Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv.  香読の有無 6 . 最初と最後の頁 13998-14003	Pd/Norbornene-Catalyzed C-H Activation	
日報論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)   重読の有無   有   オープンアクセス   本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   7 . Shi raogawa, M. Ehara   4 . 巻   3   3   3   3   3   3   3   3   3		6 . 最初と最後の百
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04720d  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)  I 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2. 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3. 雑誌名 ChemPhotoChem  おもプンアクセス  「表著名 T. Shiraogawa, M. Ehara  I 表著名 T. Shiraogawa, M. Ehara  I 表表では、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現と最後の頁で707-718  「表現の表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現の表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現の目に表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現の目に表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現の目に表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現の目に表現の目に表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現の目に表現の目に表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現の目に表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現のと思想をの目に表現を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現のと思想を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現のと思想を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現のと思想を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現のと思想を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現のと思想を表現して、 Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines I 表現の表現の表現の表現の表現の表現の表現の表現の表現の表現の表現の表現の表現の表		
10.1039/c9sc04720d 有	chem. Scr.	113-125
10.1039/c9sc04720d 有		
10.1039/c9sc04720d 有		
10.1039/c9sc04720d 有	掲載論文のDOL(デジタルオブジェクト識別子)	査詰の有無
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)  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2 . 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3 . 韓誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  1 . 養語名 RSC Adv.  『報誌名 RSC Adv.  『報誌名 RSC Adv.  『記述の表記  『記述		
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2 . 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv.  「複載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  直読の有無  「 5 . 発行年 2019年  「 5 . 発行年 2019年  「 6 . 最初と最後の頁 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003	10.1039/c9sc04/20d	月
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2 . 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv.  「複載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  直読の有無  「 5 . 発行年 2019年  「 5 . 発行年 2019年  「 6 . 最初と最後の頁 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003		
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara  2 . 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv.  「複載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  直読の有無  「 5 . 発行年 2019年  「 5 . 発行年 2019年  「 6 . 最初と最後の頁 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003  「 73998-14003	オープンアクセス	国際共著
1. 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara 2. 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines 3. 雑誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  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  1. 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3. 雑誌名 RSC Adv.  「表読の有無 2. 論文標題 Single-Walled Carbon Nanotubes 3. 雑誌名 RSC Adv.  「表読の有無 2. 意識が表記を表記を表記を表記を表記を表記を表記を表記を表記を表記を表記を表記を表記を表	=	
T. Shiraogawa, M. Ehara  2. 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines  3. 雑誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  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  1. 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3. 雑誌名 RSC Adv.  3	オープンデッセスとしている(また、その予定である)	以当りる
T. Shiraogawa, M. Ehara  2. 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines  3. 雑誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  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  1. 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3. 雑誌名 RSC Adv.  3		
T. Shiraogawa, M. Ehara  2. 論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines  3. 雑誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  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  1. 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3. 雑誌名 RSC Adv.  3	1.著者名	4 . 巻
2.論文標題 Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines  3.雑誌名 ChemPhotoChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  1.著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2.論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3.雑誌名 RSC Adv.  「表現の関係を表現します。 「表現の関係を表現します。 A ・巻 9	T Shirangawa M Fhara	
Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines  3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  「根載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  10.1002/cptc.2019006	1. Silitaogawa, w. Lilata	0
Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines  3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  「根載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064  10.1002/cptc.2019006		
Approach: Modification Guidelines  3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  信託の有無 10.1002/cptc.201900064  オープンアクセス  本ープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難  1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3 . 雑誌名 RSC Adv.  「表記の有無  「おんだないのでは、文はオープンアクセスが困難」 「おんだないのでは、文は、文はオープンアクセスが困難」 「おんだないのでは、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は	2 . 論文標題	5.発行年
Approach: Modification Guidelines  3 . 雑誌名 ChemPhotoChem  信託の有無 10.1002/cptc.201900064  オープンアクセス  本ープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難  1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3 . 雑誌名 RSC Adv.  「表記の有無  「おんだないのでは、文はオープンアクセスが困難」 「おんだないのでは、文は、文はオープンアクセスが困難」 「おんだないのでは、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は、文は	Theoretical Study on the Ontical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton	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		2010
Ritimate ChemPhotoChem 707-718 707-718 707-718 月載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 有		
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064 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 - 1. 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3. 雑誌名 RSC Adv.	3 . 維誌名	6.最例と最後の貝
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.201900064 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 - 1. 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3. 雑誌名 RSC Adv.	ChemPhotoChem	707-718
10.1002/cptc.201900064 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 - 1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv. 6 . 最初と最後の頁 13998-14003		
10.1002/cptc.201900064 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 - 1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv. 6 . 最初と最後の頁 13998-14003		
10.1002/cptc.201900064 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 - 1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv. 6 . 最初と最後の頁 13998-14003	I TO MATERIAL A	<del></del>
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  1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3 . 雑誌名 RSC Adv.  「表初と最後の頁 13998-14003	掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	<b></b>
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  1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3 . 雑誌名 RSC Adv.  「表初と最後の頁 13998-14003	10.1002/cptc.201900064	有
### And Picture		.,
### And Picture	+ -f\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.\.	<b>国際共</b> 業
1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  査読の有無		<b>国际</b> 共者
1 . 著者名 Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara 2 . 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes 3 . 雑誌名 RSC Adv.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  査読の有無	オーブンアクセスではない、又はオーブンアクセスが困難	-
Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3. 雑誌名 RSC Adv.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  査読の有無		
Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase, M. Ehara  2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3. 雑誌名 RSC Adv.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  査読の有無	1 ****	4 <del>*</del>
M. Ehara  2. 論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3. 雑誌名 RSC Adv.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  査読の有無		· <del>-</del>
2.論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes5.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)査読の有無	Y. Maeda, K. Kuroda, H. Tambo, H. Murakoshi, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, S. Nagase,	9
2.論文標題 Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes5.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)査読の有無	M. Ehara	
Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes  3.雑誌名 RSC Adv.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)  査読の有無		5 発行任
Single-Walled Carbon Nanotubes       6.最初と最後の頁         3.雑誌名       6.最初と最後の頁         RSC Adv.       13998-14003         掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)       査読の有無		
3.雑誌名       6.最初と最後の頁         RSC Adv.       13998-14003         掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)       査読の有無	Intluence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized	2019年
3.雑誌名       6.最初と最後の頁         RSC Adv.       13998-14003         掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)       査読の有無		
RSC Adv. 13998-14003   指載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)		
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無	Single-Walled Carbon Nanotubes	6 最初と最後の自
	Single-Walled Carbon Nanotubes 3.雑誌名	
10.1039/c9ra02183c 有	Single-Walled Carbon Nanotubes 3.雑誌名 RSC Adv.	13998-14003
	Single-Walled Carbon Nanotubes 3.雑誌名 RSC Adv. 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	13998-14003 査読の有無
	Single-Walled Carbon Nanotubes 3.雑誌名 RSC Adv. 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	13998-14003 査読の有無
オープンアクセス 国際仕並	Single-Walled Carbon Nanotubes 3.雑誌名 RSC Adv. 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	13998-14003 査読の有無
	Single-Walled Carbon Nanotubes 3.雑誌名 RSC Adv. 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9ra02183c	13998-14003 査読の有無 有
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	Single-Walled Carbon Nanotubes 3.雑誌名 RSC Adv. 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9ra02183c オープンアクセス	13998-14003 査読の有無 有 国際共著

1 . 著者名	
	4 . 巻
M Suda V Ibathong V Promarak H Kolima M Nakamura I Shiraogawa M Ebara H M	10
M. Suda, Y. Thathong, V. Promarak, H. Kojima, M. Nakamura, T. Shiraogawa, M. Ehara, H. M.	10
Yamamoto	
2 . 論文標題	5 . 発行年
Light-Driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters	2019年
Light billion morecular curton for Resoningulation opin i i i i i i	2010—
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Nature Commun.	2455
nataro commun.	2400
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1038/s41467-019-10423-6	有
10.1030/541407-019-10423-0	F
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	該当する
(and the contract of the contr	1 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
1.著者名	│ 4.巻
S. Kinoshita, Y. Inokuchi, Y. Onitsuka, H. Kohguchi, N. Akai, T. Shiraogawa, M. Ehara, K.	21
Yamazaki, Y. Harabuchi, S. Maeda, T. Ebata	
2.論文標題	5 . 発行年
The Direct Observation of the Doorway 1n * State of Methylcinnamate and Hydrogen-Bonding	2019年
Title business the District was to Cinetia to the Double to the District was the District was to Cinetia to the District was to the District was to Cinetia to the District was to the Distri	2013-
Effects on the Photochemistry of Cinnamate-Based Sunscreens	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Phys. Chem. Chem. Phys.	19755-19763
rnyo. onom. onom. rnyo.	10100-10100
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
10.1039/C9CP02914A	有
オープンアクセス	国際共著
· · · · · · = · ·	
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	-
1.著者名	4 . 巻
	123
	123
P. Zhao, Y. Maeda, M. Ehara	·=*
P. Znao, Y. Maeda, M. Enara	1
2 . 論文標題	5.発行年
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon	
2 . 論文標題	5.発行年
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
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁
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
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名 J. Phys Chem. C	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名 J. Phys Chem. C	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名 J. Phys Chem. C	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名 J. Phys Chem. C	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3.雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3. 雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655  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	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1. 著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3. 雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1. 著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota 2. 論文標題	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1. 著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1. 著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2. 論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3.雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655  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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[(Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3.雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655  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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[(Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3.雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655  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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[ (Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation  3.雑誌名	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3.雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[(Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3.雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655  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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[ (Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation  3.雑誌名	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655  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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[ (Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation 3.雑誌名 Chem. Eur. J	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 3650-3661
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[ (Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation 3.雑誌名 Chem. Eur. J	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3.雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655  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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[(Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation  3.雑誌名 Chem. Eur. J	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 3650-3661
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3. 雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1. 著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota 2. 論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[ (Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation 3. 雑誌名 Chem. Eur. J	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 3650-3661
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3.雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[(Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation  3.雑誌名 Chem. Eur. J  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201805785	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 3650-3661 査読の有無 有
2.論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory 3.雑誌名 J. Phys Chem. C 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1.著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2.論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[(Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation 3.雑誌名 Chem. Eur. J	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 3650-3661 査読の有無 有
2. 論文標題 Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on the Clar Sextet Theory  3. 雑誌名 J. Phys Chem. C  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b03655 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  1. 著者名 R. Inoue, M. Naito, M. Ehara, T. Naota  2. 論文標題 Heat-Resistant Properties in Phosphorescence of Trans Bis[(Iminomethyl)Aryloxy]platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- Conjugation  3. 雑誌名 Chem. Eur. J  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201805785	5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 18629-18637 査読の有無 有 国際共著 4 . 巻 25 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 3650-3661

1.著者名	4 . 巻
M. Ehara, U. Deva Priyakumar	19
2 *6-1-1-05	5 78/= F
2.論文標題	5 . 発行年
Gold-Palladium Nanocluster Catalysts for Homocoupling: Electronic Structure and Interface	2019年
Dynamics	
3 . 雑誌名	6.最初と最後の頁
Chem. Rec.	947-959
日本学会会の2017   マップ・ロー・マップ・ロー・神のコフン	本芸の大畑
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1002/tcr.201800177	有
「 オープンアクセス	国際共著
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	該当する
13 227 7 CM Clordov ( Miles) 227 7 CM Electrical Control of the Co	ma / o
1.著者名	4 . 巻
	_
Y. Maeda, Y. Konno, M. Yamada, P. Zhao, X. Zhao, M. Ehara, S. Nagase	10
- 44.3 (202	- 77 (- (-
2.論文標題	5 . 発行年
Control of Near Infrared Photoluminescence Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes by	2018年
Functionalization with Dendrons	· - ·
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Nanoscale	23012-23017
Natioscare	23012-23017
<u></u>   掲載論文のDOI ( デジタルオブジェクト識別子 )	 査読の有無
10.1039/c8nr07983h	有
オープンアクセス	国際共著
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	該当する
1.著者名	4 . 巻
	_
P. Hirunsit, T. Toyao, S. M. A. H. Siddiki, K. Shimizu, M. Ehara	19
A A LIEUT	= 7V./= <del> -</del>
2.論文標題	5 . 発行年
Origin of Nb2O5 Lewis Acid Catalysis for Activation of Carboxylic Acids in the Presence of Hard	2018年
Base	
3   新歌 <del>作</del>	6 最初と最後の自
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
3.雑誌在 ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)	6.最初と最後の貝 2848-2857
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)	2848-2857
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	2848-2857 査読の有無
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)	2848-2857
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723	2848-2857 査読の有無 有
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723 オープンアクセス	2848-2857 査読の有無 有 国際共著
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723	2848-2857 査読の有無 有
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723 オープンアクセス	2848-2857 査読の有無 有 国際共著
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723 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	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723 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	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723 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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723 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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara 2 . 論文標題	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723 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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2 . 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723 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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2 . 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2 . 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study 3 . 雑誌名	2848-2857査読の有無 有国際共著 該当する4 . 巻 405 . 発行年 2018年6 . 最初と最後の頁
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2 . 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40 5 . 発行年 2018年
ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809) 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2 . 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study 3 . 雑誌名	2848-2857査読の有無 有国際共著 該当する4 . 巻 405 . 発行年 2018年6 . 最初と最後の頁
Ritimation Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1. 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2. 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study  3. 雑誌名 J. Comput. Chem.	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40 5 . 発行年 2018年 6 . 最初と最後の頁 127-134
Risting ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1.著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2.論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-Cl and TD-DFT Study  3.雑誌名 J. Comput. Chem.	2848-2857査読の有無国際共著該当する4 . 巻 405 . 発行年 2018年6 . 最初と最後の頁 127-134査読の有無
Ritimation Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1. 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2. 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study  3. 雑誌名 J. Comput. Chem.	2848-2857 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40 5 . 発行年 2018年 6 . 最初と最後の頁 127-134
Ritimation ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)    掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	直読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40 5 . 発行年 2018年 6 . 最初と最後の頁 127-134
Right ChemPhysChem. (Front Cover p. 2804, Cover Profile p. 2809)  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2 . 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study  3 . 雑誌名 J. Comput. Chem.	直読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40 5 . 発行年 2018年 6 . 最初と最後の頁 127-134 直読の有無 有
R載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800723  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, G. Candel, R. Fukuda, I. Ciofini, C. Adamo, A. Okamoto, M. Ehara  2 . 論文標題 Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study  3 . 雑誌名 J. Comput. Chem.	直読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 40 5 . 発行年 2018年 6 . 最初と最後の頁 127-134

1.著者名	4 . 巻
A. Junkaew, S. Namuangruk, P. Maitarad, M. Ehara	8
2 . 論文標題	5 . 発行年
Silicon-Coordinated Nitrogen-Doped Graphene as a Promising Metal-Free Catalyst for N20	2018年
Reduction by CO: A Theoretical Study	2010—
	6 目知し目後の否
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
RSC Adv.	22322-22330
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1039/c8ra03265c	
10.1039/0018032050	有
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	該当する
1.著者名	4 . 巻
T. Iwasaki, A. Fukuoka, W. Yokoyama, X. Min, I. Hisaki, T. Yang, M. Ehara, H. Kuniyasu, N.	9
Kambe	
2 . 論文標題	5 . 発行年
Nickel-Catalyzed Coupling Reaction of Alkyl Halides with Aryl Grignard Reagents in the Presence	
	2010-1
of 1,3-Butadiene: Mechanistic Studies of Four-Component Coupling and Competing Cross-Coupling	
Reactions	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Chem. Sci.	2195-2211
chem. Scr.	2193-2211
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1039/C7SC04675H	有
10.1 (0.00) (0.1 0.00)	-
ナープンフクセフ	国際什茎
オープンアクセス	国際共著
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
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	該当する
	1
オープンアクセスとしている (また、その予定である) 1.著者名	該当する
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	該当する
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara	該当する 4 . 巻 122
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題	該当する 4.巻 122 5.発行年
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara	該当する 4 . 巻 122
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題	該当する 4.巻 122 5.発行年
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water	該当する 4.巻 122 5.発行年 2018年
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water	該当する 4.巻 122 5.発行年 2018年
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  オープンアクセス	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  オープンアクセス	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci 2 . 論文標題	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39
1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water 3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems 3 . 雑誌名	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586   査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁
1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems 3 . 雑誌名	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586   査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁
1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water 3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems 3 . 雑誌名	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586   査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water 3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems  3 . 雑誌名 J. Comput. Chem.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586   査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 931-935
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems  3 . 雑誌名 J. Comput. Chem.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586   査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 931-935
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water 3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems  3 . 雑誌名 J. Comput. Chem.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586   査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 931-935
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems 3 . 雑誌名 J. Comput. Chem.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 931-935  査読の有無 有
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1.著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2.論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3.雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1.著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2.論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems  3.雑誌名 J. Comput. Chem.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586  査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 931-935  査読の有無 有
オープンアクセスとしている(また、その予定である)  1 . 著者名 T. Sommerfeld, J. B. Melugin, M. Ehara  2 . 論文標題 Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water  3 . 雑誌名 J. Phys. Chem. A.  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12669  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  1 . 著者名 T. Shiraogawa, M. Ehara, S. Jurinovich, L. Cupellini, B. Mennucci  2 . 論文標題 Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems 3 . 雑誌名 J. Comput. Chem.	該当する  4 . 巻 122  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 2580-2586   査読の有無 有  国際共著 該当する  4 . 巻 39  5 . 発行年 2018年  6 . 最初と最後の頁 931-935

1.著者名	4 . 巻
T. Sommerfeld, J. B. Melugin, P. Hamal, M. Ehara	13
2 \$6.45.45.15	F 交经/二年
2.論文標題	5.発行年
Resonance Energies and Lifetimes from the Analytic Continuation of the Coupling Constant	2017年
Method: Robust Algorithms and a Critical Analysis	て 目知し目後の苦
3 . 雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Chem. Theory Comput.	2550-2560
<u></u>   掲載論文のDOI ( デジタルオブジェクト識別子 )	   査読の有無
10.1021/acs.ictc.6b01228	有
10.1021/acs.jctc.0001220	H
オープンアクセス	国際共著
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	該当する
1.著者名	4 . 巻
T. Yang, R. Fukuda, R. Cammi, M. Ehara	121
2.論文標題	5 . 発行年
Diels-Alder Cycloaddition of Cyclopentadiene and C60 at the Extreme High Pressure	2017年
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Phys. Chem. A	4363-4371
   掲載論文のDOI ( デジタルオプジェクト識別子 )	
	有
10.1021/acs.jpca.7b02805	F
オープンアクセス	国際共著
┃	お お うり る り し
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	該当する
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 1.著者名	該当9 &
1 . 著者名	
	4.巻
1 . 著者名	4.巻
1.著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara 2.論文標題	4.巻
1.著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara 2.論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold	4 . 巻 9 5 . 発行年
1.著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara 2.論文標題	4 . 巻 9 5 . 発行年
1.著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2.論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study	4.巻 9 5.発行年 2017年
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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	4 . 巻 9  5 . 発行年 2017年  6 . 最初と最後の頁 4490-4500  査読の有無 有  国際共著 該当する
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara	4 . 巻 9  5 . 発行年 2017年  6 . 最初と最後の頁 4490-4500  査読の有無 有  国際共著 該当する
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on -Al203 Surfaces Using First-	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on -Al203 Surfaces Using First-Principles Calculations	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年 2017年
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on -Al203 Surfaces Using First-Principles Calculations  3 . 雑誌名	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on -Al203 Surfaces Using First-Principles Calculations 3 . 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 3679-3687
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on -Al203 Surfaces Using First-Principles Calculations 3 . 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 3679-3687
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on -Al203 Surfaces Using First-Principles Calculations 3 . 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 3679-3687
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on -Al203 Surfaces Using First-Principles Calculations 3 . 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 3679-3687
1 . 著者名 K. Bobuatong, H. Sakurai, M. Ehara  2 . 論文標題 Intrarmolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study  3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201700839  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  1 . 著者名 T. Yang, M. Ehara  2 . 論文標題 Probing the Electronic Structures of COn (n = 1-5) Clusters on -Al203 Surfaces Using First-Principles Calculations 3 . 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	4 . 巻 9 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 4490-4500 査読の有無 有 国際共著 該当する 4 . 巻 19 5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 3679-3687

	T
1.著者名	4.巻
T. Yang, M. Ehara	82
0. AA-JEEF	= 7V./= hr
2.論文標題	5.発行年
Computational Studies on Reaction Mechanism and Origins of Selectivities in Ni-Catalyzed	2017年
(2+2+2) Cycloadditions and Alkenylative Cyclizations of 1,6-Ene-Allenes and Alkenes	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Org. Chem.	2150-2159
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1021/acs.joc.6b02957	有
,	
オープンアクセス	国際共著
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	-
1 . 著者名	4 . 巻
M. Savarese, U. Raucci, R. Fukuda, C. Adamo, M. Ehara, N. Rega, I. Ciofini	38
m. davarese, o. nadeer, n. rukuda, o. Adamo, m. Enara, n. nega, r. oromin	
2.論文標題	5.発行年
	2017年
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	ZU17 <del>F</del>
0, ,	6 見知し見後の古
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Comput. Chem	1084-1092
担無於立のPOL / デンジカルナゴンジュカト禁助フト	大芸の左仰
掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子)	査読の有無
10.1002/jcc.24780	有
	COLORS ALL THE
オープンアクセス	国際共著
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	該当する
1.著者名	4 . 巻
T. Yang, R. Fukuda, S. Hosokawa, T. Tanaka, S. Sakaki, M. Ehara	9
	9
T. Yang, R. Fukuda, S. Hosokawa, T. Tanaka, S. Sakaki, M. Ehara 2.論文標題	5 . 発行年
2 . 論文標題	
	5.発行年
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe,	5.発行年
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni)	5.発行年 2017年
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -Al203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -Al203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713 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	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -Al203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -Al203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713 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	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3. 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1. 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. MichI	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3. 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1. 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl 2. 論文標題	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3. 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1. 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. MichI	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3. 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1. 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl  2. 論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3. 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1. 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl  2. 論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes  3. 雑誌名	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年 6 . 最初と最後の頁
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1.著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl  2.論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3. 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1. 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl  2. 論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes  3. 雑誌名	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年 6 . 最初と最後の頁
2 . 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1 . 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl 2 . 論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes  3 . 雑誌名 ChemPhysChem	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年 6 . 最初と最後の頁 3010-3022
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI2O3 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3. 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1. 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl  2. 論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes  3. 雑誌名 ChemPhysChem	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年 6 . 最初と最後の頁 3010-3022
2.論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -AI203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3.雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1.著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl  2.論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes  3.雑誌名 ChemPhysChem	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年 6 . 最初と最後の頁 3010-3022
2 . 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -Al203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1 . 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl 2 . 論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes  3 . 雑誌名 ChemPhysChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201600633	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年 6 . 最初と最後の頁 3010-3022 査読の有無 有
2 . 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -Al203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3 . 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1 . 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl 2 . 論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes  3 . 雑誌名 ChemPhysChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201600633  オープンアクセス	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年 6 . 最初と最後の頁 3010-3022
2. 論文標題 A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts M1/ -Al203 (M = Pd, Fe, Co, and Ni) 3. 雑誌名 ChemCatChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201601713  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  1. 著者名 Y. Kanazawa, H. Tsuji, M. Ehara, R. Fukuda, D. L. Casher, K. Tamao, H. Nakatsuji, J. Michl  2. 論文標題 Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes  3. 雑誌名 ChemPhysChem  掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201600633	5 . 発行年 2017年 6 . 最初と最後の頁 1222-1229 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 19 5 . 発行年 2016年 6 . 最初と最後の頁 3010-3022 査読の有無 有

1. 著者名	4 . 巻
A. Gupta, B. Boekfa, H. Sakurai, M. Ehara, U. Deva Priyakumar	120
2.論文標題	5.発行年
Structure, Interaction, and Dynamics of Au/Pd Bimetallic Nanoalloys Dispersed in Aqueous	2016年
Ethylpyrrolidone, a Monomeric Moiety of Polyvinylpyrrolidone	
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
J. Phys. Chem. C	17454-17464
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1021/acs.jpcc.6b05097	有
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	該当する

〔学会発表〕	計36件	(うち招待講演	36件 / うち国際等	之会 27件
しナム元収!	DIOCII '			

- 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
2 : 光衣標題 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)
版妹子云 石于云 \$40回复UVIIII尼云(10时确决)
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)
Tale and approach the matter and controlled 2010 (Mooth 2010) (International 201
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)
. Water
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
Theoretical chemistry for comprex systems, nanocruster and neterogeneous catalysts
2 244
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
Masanii Chara
2. 改丰価昭
2.発表標題
2 . 発表標題 Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI: Collaboration with ATR-FUV Spectroscopy
Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI: Collaboration with ATR-FUV Spectroscopy
Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI: Collaboration with ATR-FUV Spectroscopy  3 . 学会等名
Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI: Collaboration with ATR-FUV Spectroscopy
Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI: Collaboration with ATR-FUV Spectroscopy  3 . 学会等名
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)
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
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)
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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)
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
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)
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
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

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
W. Enara
2.発表標題
Interface in Supported Nanocluster Catalysts
3.学会等名
3 . 子云寺石   First Joint Symposium of IMS-NANOTEC(招待講演)(国際学会)
4.発表年
4 . 光衣牛   2017年
1.発表者名 M. Ehara
2 . 発表標題
Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI
The 2nd International Symposium on Quantum Chemistry at Kwansei Gakuin University(招待講演)(国際学会)
2017年
1.発表者名
1.光衣有右   M. Ehara
2.発表標題
Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI and ACCC SAC-CI
The 8th Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry (APCTCC)(招待講演)(国際学会)
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
BJᄍᅃᄱᅓᄽᆂᄤᄢᄌ
3.学会等名
3.学会等名 第11回分子科学討論会(招待講演)
第 1 1 回分子科学討論会(招待講演) 4 . 発表年
第11回分子科学討論会(招待講演)
第 1 1 回分子科学討論会(招待講演) 4.発表年

1.発表者名
M. Ehara, T. Sommerfeld
50 AV 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
2、艾生+瓶店
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)
Necett Advances III many-creation meony (NAMICI) 2017 (3月15時度) (国际子云)
. The day law
4. 発表年
2017年
1.発表者名
M. Ehara
m. Lilaia
2.発表標題
Relevance of Interface Region in Supported Nanocluster Catalysts
2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
2 24 6 77 67
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
<b>2017</b>
. Net to
1. 発表者名
江原正博
2.発表標題
4 . TL1X1 TL 4X
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
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
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
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
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)
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
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)
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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 ISTOP IX 2016 Conference (招待講演)(国際学会)
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
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 ISTOP IX 2016 Conference (招待講演)(国際学会)
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
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

1 . 発表者名
M. Ehara
2.発表標題
Recent Progress in PCM SAC-CI and CAP/SAC-CI
Recent Flogress III Fow SAC-CI and GAF/SAC-CI
W. J. 100 E.
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
2010
4 N=+40
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
W. Lilata
o Notare
2 . 発表標題
Charge Transfer Excitations Studied by the SAC-CI Method
Charge Transfer Excitations Studied by the SAC-CI Method
Charge Transfer Excitations Studied by the SAC-CI Method
Charge Transfer Excitations Studied by the SAC-CI Method
3.学会等名
3. 学会等名 Workshop: Excited States in Complex Systems (ESCS2016), (招待講演) (国際学会)
3. 学会等名 Workshop: Excited States in Complex Systems (ESCS2016), (招待講演) (国際学会) 4. 発表年
3. 学会等名 Workshop: Excited States in Complex Systems (ESCS2016), (招待講演) (国際学会)
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
3. 学会等名 Workshop: Excited States in Complex Systems (ESCS2016), (招待講演) (国際学会) 4. 発表年
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
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
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
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
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
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
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
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
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
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 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 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 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)
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 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
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)
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

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	战略∼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		
20104		
[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 計算科学科 http://tc.ims.ac.jp/	が光セノター 江原研光室	
C THE STANDARD		
6.研究組織 氏名	所属研究機関・部局・職	
(ローマ字氏名) (研究者番号)	(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		
	Rajamangala University of Technology		
米国	University of Colorado		
イタリア	University of Naples		