

令和 5 年 5 月 24 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2021

課題番号：17H03009

研究課題名(和文) 溶液内の遷移金属錯体・クラスターの安定性とダイナミクスに関する講究

研究課題名(英文) Theoretical studies on the stability and dynamics of transition metal complexes and clusters in the solution phase

研究代表者

佐藤 啓文 (SATO, Hirofumi)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：70290905

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,900,000円

研究成果の概要(和文)：これまでに我々が開発してきた量子化学・統計力学およびこれらの統合理論を基軸として新規手法を創出し、配位型自己集合錯体やクラスターなどの幅広い多原子分子系に対して電子状態や溶液中の安定性・ダイナミクスを調べた。得られた成果は、(1) 量子化学の方法に基づく、物理化学的に見通しの良い、分子の電子状態の記述、(2) 溶媒和や凝縮系における動態を解析的・代数的に扱う統計力学理論、および(3) これらを統合的に扱う理論体系の構築、の3つに大別される。二電子関数に基づく電子状態理論や古典的密度汎関数理論に基づく液体論などの新規理論を開発し、様々な系における分子論的な描像を明らかにすることに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

現実の化学現象は非常に複雑である。数値的複雑さを可能な限り回避しながら、化学的直観を担保し、物理化学的に見通しの良い視座の確立は重要な意味を持つ。分子に立脚した理論体系の構築は化学と物理学の狭間であり、双方からの注目を受けているにもかかわらず未だにその理解が十全に進んでいるとは言い難い。本課題で開発した分子の電子状態や溶媒和を記述する理論は、より系統的な理解体系の確立を目指しながら現実の化学現象の本質を究めようとするものである。また分子の構造や動態の表現法についても従前とは異なる観点から検討を行なった。一連の取り組みは今後の分子理論の基盤に関わり、その学術的な意義や影響は大きい。

研究成果の概要(英文)：Based on the quantum chemistry, statistical mechanics, and integrated theory we have developed so far, we created new methods to investigate the electronic structure, stability, and dynamics in solutions for a wide range of polyatomic molecular systems, including the coordination self-assembly and clusters. The achievements are classified into three categories: (1) physicochemically clear descriptions of the electronic structure of molecules based on quantum chemical methods, (2) a statistical mechanics theory that deals analytically and algebraically with the stability and dynamics in solvation systems, and (3) theoretical approaches that integrate the above. New theories were developed, such as electronic structure theory based on the two-electron function and liquid theory based on classical density-functional theory. Our theoretical approaches have successfully clarified the molecular picture in various systems.

研究分野：理論的アプローチに基づく物理化学

キーワード：量子化学 遷移金属錯体 液体の統計力学 モデルハミルトニアン

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

新規物質の合成反応や触媒、電極材料など、遷移金属が今日の化学において果たす役割は極めて大きい。こうした多様な現象を産み出しているのは、エネルギー的にも空間的にも集約された d 電子の特性にある。その一方で、これはまた現象の物理化学・理論化学的な理解を困難とする一因ともなっている。上記の現象に含まれる化学反応や分子のイオン化、電子励起などの過程は全て電子状態変化に帰せられ、量子化学に基づく理解が欠かせない。さらに現実の化学現象においては無数の分子が互いに強く相互作用し影響しあう。我々が直接扱う材料は巨視的スケールの複雑なシステムであり、集団としての分子特性を理解することも本質である。すなわち量子化学および統計力学の観点双方に立ってこそ、物質の本質を捉えることができると言っても過言ではない。

代表者・佐藤は、長期にわたって量子化学・統計力学の双方に立脚した研究を展開し、ハイブリッド法 (RISM-SCF-SEDD 法、3D-RISM-SCF 法、MC-MOZ-SCF 法など) を通じて現実の現象の理解を深化させるとともに、分子ダイナミクス統計力学理論である 3D-SSSV 法の開発にも成功していた。一方、分担者・井内は、主に遷移金属錯体を対象として、量子化学モデルハミルトニアン (QMHM) を開発していた。この方法におけるハミルトニアン H_{model} は、遷移金属 M (Racah パラメーター)、金属と配位子間の静電、交換、電荷移動相互作用と配位子間相互作用から構成される。これらのうち、静電、交換、電荷移動相互作用は、重なり積分とパラメータからなり、高精度電子状態計算を再現するようにパラメータが決定される。 H_{model} は d 電子の配置数に対応した次元を有し、電子状態は対角化して得られる。すなわち分子の電子状態を d 電子配置に直接結びつけることができる。このように電子状態の枢要部分のみに着目することで、高い精度を担保しつつ、計算時間を大幅に短縮することができる。DFTB 法や PM3 法などの半経験的手法と比肩するものだが、 H_{model} が局所的相互作用に基づいており、原子価結合 (VB) 法に類似の設計指針を持つ。このため配位子場理論のように化学的直感に馴染みやすく、見通しが良い点も特長である。

2. 研究の目的

この課題では、遷移金属錯体を代表とする分子の電子状態と分子の溶媒和・動態に関わる研究を出発点として、幅広い化学現象に対する統合的な取り扱いの確立を目指した。以下、三つの項目に大別して説明する。

【量子化学】電子状態については QMHM を用いて、遷移金属を 10-20 原子程度以上含む配位型自己集合錯体の計算の実現を目標として掲げた。また、より幅広い分子を対象として、量子化学を基調とした、物理化学的に見通しの良い、分子の電子状態および構造に関する理論を開発する。

【統計化学】溶媒和・動態に関わる統計力学理論については 3D-RISM や 3D-SSSV 法を基軸として、その有用性や限界・問題点を調べた。また従来法の抱える問題点の解決を目指し、液体構造を記述する新しい統計力学理論を開発する。

【統合的発展】前項 2 つおよびそれらのハイブリッド法に基づきながら、溶液内分子の様々な性質を調べる。また拡散や動態を念頭に、原子・分子の集合過程について調べ、系を特徴づける自由度に関する理解を深める。

3. 研究の方法

【量子化学】取り組みは以下の通り三つに大別される。

- 配位型自己集合錯体に対しては、金属-配位子間の結合の記述が鍵となり、通常密度汎関数理論や非経験的量子化学計算も容易でなく、電子状態を扱えない古典力場では歯が立たない。材料分野では Sutton-Chen や Gupta などの金属用ポテンシャルが知られているが、そのまま有機分子配位子と結合させ、遷移金属錯体一般へと展開できない、などの問題があった。QMHM はこれらを解決できる。
- 分子内自由度の数が増せば、様々な配置が安定となり構造異性体の数も増える。そこで金属クラスターなどを対象に、安定構造探索の強力なアルゴリズムとして知られている Basin-Hopping 法などを援用し、量子化学計算に基づく網羅的構造探索・決定の方法について調査した。
- QMHM で配位子は力場で取り扱われている。錯体全体をより統一的に扱うことも視野に、典型元素のみからなる分子を主な対象として、電子状態や結合の本質のみを抽象的に抜き出す新しい解析理論の開発に取り組んだ。さらに結合形態に対する理解を深め、分子の電子状態を記述できる新しい方法を検討した。

【統計化学】取り組みは以下の通り二つに大別される

- 既存の RISM や 3D-RISM や 3D-SSSV など、液体・溶液の構造や動態を記述する統計力学理論について、その利点や問題点を整理し、さらなる発展法の可能性を検討した。
- 実験結果が報告されている系などを対象に、固液界面近傍の溶媒和について調べた。

【統合的発展】量子化学および統計化学におけるアプローチを組み合わせた様々な理論について検討を行なった。ただし、新規性の高い理論については、たとえ新しい理論表式が得られても、数値的安定性など思わぬ困難があることが予想されていたことから慎重な検討を行った。また多原子分子の配位や動態については、その自由度の取り扱いが鍵となる。これは【量子化学】における網羅的構造探索にも関係している課題であり、様々なアプローチについて検討を行なった。

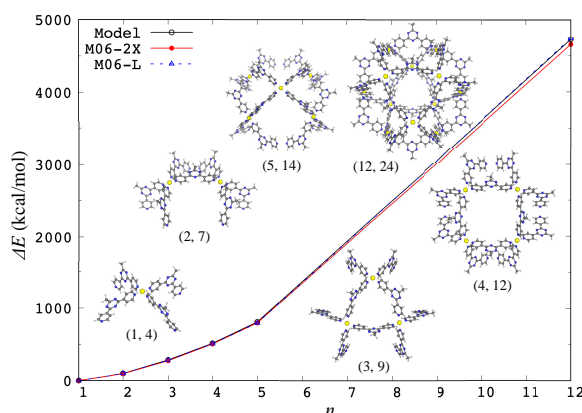
4. 研究成果

【量子化学】

(1) QMHM については、平岡らが開発した八面体カプセル型のパラジウム錯体 $[M_6L_8]^{12+}$ および藤田らによるかご型球状錯体 $[M_nL_{2n}]^{2n+}$ を対象とした。後者は同じ遷移金属および配位子で構成される異なるサイズの分子の存在が知られており、体系的な計算および解析ができる点で対象分子として最適と考えた。また QMHM を金属-金属間の相互作用に対する拡張の可能性について検討した。

平岡らが開発した八面体カプセル型のパラジウム錯体 $[M_6L_8]^{12+}$ を対象とした解析を行なった。具体的には Pd イオンと配位子をモデル化したピリジン (Py) からなる $[PdPy_4]^{2+}$ における配位子置換反応について通常密度汎関数理論 (DFT) による計算を行い、この結果を 1 kcal/mol 程度の差異で再現できるようにモデルのパラメータを決定した。ついでこのモデルを用いて八面体カプセル型錯体を構成する 10 種類以上の過渡種について計算を行った。DFT 計算と比較した誤差の絶対値はやや大きくなるものの、全体のエネルギーに対しては数パーセント程度であり、十分な精度で幅広い化学種の計算が可能となった。

藤田らによるかご型球状錯体 $[M_nL_{2n}]^{2n+}$ ($n=2$ から 12) に対して解析を行なった。一連の錯体においてはサイズが大きくなるにつれて、全電荷が大きくなっていく。すなわち部位間の静電反発が大きくなり結果として全エネルギーは増大していく (図)。作成した QMHM は、すべてのサイズの錯体に対して、通常密度汎関数理論 (DFT) の値を適切に再現しており、バランスよく系を記述できていることがわかる。一方で適切な精度で安定性を議論するために溶媒和効果の考慮が必須であり、一般化ボルンモデル法と組み合わせた。現実の系におけるこれら錯体の相対的安定性を議論する上では、対アニオンの寄与が重要であり、さらに適切な安定構造や配向を決定するためには一般化ボルンモデルを含めたエネルギー勾配法が必要であった。これを開発したことで現実の系におけるかご型球状錯体の相対的安定性を自由エネルギーに基づいて議論することが可能となった。



Reproduced from *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2021, **23**, 866 with permission from the Royal Society of Chemistry.

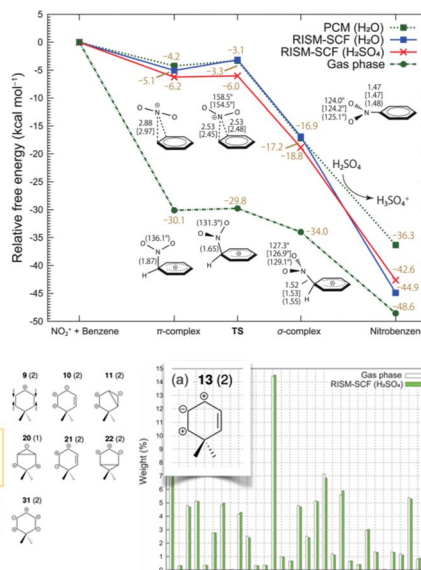
(2) 量子化学計算に基づく網羅的構造探索を行い、広域なポテンシャルエネルギー面を特徴づける方法について理解を深めた。

佃研究室で観測されている Al_nC_2 の構造探索を行い、サイズ毎の安定構造について調査した。距離幾何に基づく探索アルゴリズムを開発することによって、広域な構造探索を可能とした。QMHM の利用や、より簡便な経験ポテンシャルの利用によるエネルギー評価も検討したが、最終的には小サイズのクラスターについて CCSD 法などの高精度計算法と比較しながら汎用の密度汎関数理論を用いた。n=11 までで最安定構造の他に準安定構造 (異性体) を 900 以上見つけ出すことに成功した。

ピンサー型配位子を有する Ru 錯体による水の分解反応を対象として、量子化学計算と basin-hopping や doubly nudged elastic band 法を組み合わせることで広域的な構造探索を行い、200 程度の安定構造、遷移状態構造を決定した。エネルギー地形理論の観点から、この触媒反応系は階層構造を有しており、これらの多数の準安定構造間の複雑な転移として反応過程を捉えられることを示した。

(3) 比較的簡単な分子を対象として、その電子構造を解析する量子化学的な方法を開発し、様々な分子や化学反応における電子状態を共鳴構造の観点から明らかにした。さらにこうして得られた知見は、新しい電子状態理論の開発へと結実した。

非直交スピン軌道の第二量子化演算子による共鳴構造の解析法を開発し、分子軌道法計算の結果から化学結合を原子価結合法のような観点で解析することを可能とした。従前の類似法とは異なり、一般的な量子化学計算で得られる結果から容易に計算可能であること、対象となる電子数の拡張が容易であることなどの利点がある。この方法により、ホルムアミドや diazadiboretidine、ベンゼンのニトロ化反応における電子状態の解析を行なった。このうちニトロ化反応は硫酸環境下での計算を実現した初めての報告であり、掲載誌のカバーアートに採用されている。



Reproduced from *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2022, **24**, 16453 with permission from the Royal Society of Chemistry.

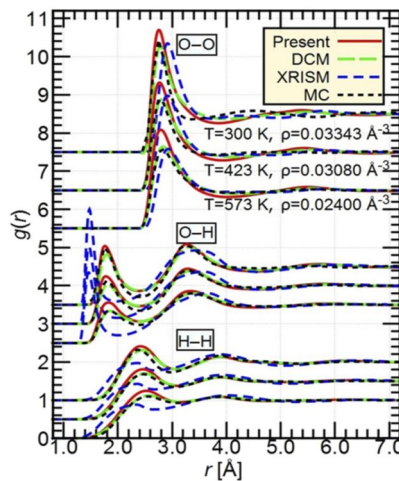
電子対 (ジェミナル) を基調とした新しい電子状態理論を開発した。このコンセプトを分子の電子状態をスピンのみから構成するハイゼンベルグ型モデルおよび非経験的電子状態理論に対して展開し、数値計算を通じてその有用性を実証した。特に後者は静的(強い)電子相関の記述に有効であり、従来のジェミナル理論を改善している。

【統計化学】

3D-RISM 法などを用いて液体分布を調べるとともに、液体の構造や熱力学量をより適切な記述を目指して、多くの新規理論を開発した。

(1) 3D-SSSV 法や、拡散律速反応を記述する理論など、溶液内分子のダイナミクスを記述するための統計力学理論、とりわけ相互作用点表示に基づく液体の積分方程式理論に取り組み、整理した。また三次元空間における拡散方程式を数値的に安定に解く技術を確立した。これまでの発展を総括した総説を *Phys. Chem. Chem. Phys.* 誌に発表している。

液体の静的構造に対して、古典系の密度汎関数の枠組みに依拠した複数の新規理論を完成させた。多原子分子液体に対しては、RISM を含む分子性液体の統計力学理論で汎用される相互作用点モデルを整理して定式化することに成功した。この結果から同モデルの際限が浮き彫りとなった。また単純液体を対象とした重み付き密度近似に基づく自由エネルギー汎関数に対する階層的な方程式の導出と計算に成功した。相転移の記述を念頭に理論の拡張を進め、国際的にも注目を集めている。



Reprinted with permission from *J. Chem. Phys.* **153**, 164102. Copyright 2020, AIP Publishing. This article may be downloaded for personal use only. Any other use requires prior permission of the author and the AIP Publishing

(2) 3D-RISM 法に基づき、固液界面における分子論的な描像を明らかにした。

リチウムイオン二次電池で重要となるグラファイト近傍の電解質を構成するイオンと溶媒の構造について明らかにした。

Pt(111)面への芳香族分子(ベンゼンおよびフェノール)の吸着について調べた。これらの系は熱力学量に関して実験的に詳細なデータが得られており、モデル系に対する計算結果と直接比較することが可能である。周囲の水和構造と自由エネルギーをはじめとする熱力学量を求め、実験結果との適切な一致を見出した。

さらに 3D-RISM 法と密度行列埋込理論を組み合わせたハイブリッド理論の開発も行なった。

【統合的発展】

量子化学と統計力学(液体の統計力学理論)およびそれらのハイブリッド法に基づきながら、溶液内分子の様々な性質を調べた。また NMR 遮蔽定数の第一原理的な計算法を確立した。拡散を念頭におきながら、原子・分子の集合過程について調べ、系の構造や動態を特徴づける自由度に関する理解を深めた。

(1) ナノキューブの自己集合過程の解析法を開発した。相互作用する分子を記述する上で、自由度が多くなると、3D-SSSV 法などの時間依存分布関数を通じた取り扱いは困難である。そこで(i)粗視化モデルを新たに作成することで自由度を軽減し、(ii) 分子動力学計算を行ってエネルギー面の大域的探索を行うことで、こうした困難を解決した。得られた構造群をクラスタリングによって分類し、形成・遷移過程を特徴付けることで反応経路を浮き彫りにした。

(2) 分子の構造は三次元の直交座標系を用いて規定されるが、Z-matrix などの内部座標でも表現される。前者は回転や並進に関する6つの自由度を含んでおり、後者にも恣意性や冗長性がある。分子の離散集合を考察する上では、こうした観点の整理が有用であることが分かってきた。実際、機械学習などの利用にあたって分子構造の表現に対する議論が最近加熱しており、例えば最近 Ceriotti らは既存法の欠点を指摘している。こうしたことから、対称座標を導入することでこれら複数の座標表現を結びつけ、冗長性を取り除くプログラムコードを開発し、具体的な分子へ適用した。また、分子の構造を距離幾何に基づいて記述する方法について考察した。金クラスター系を対象として、実際に構造を計算するアルゴリズムを開発した(右図)。

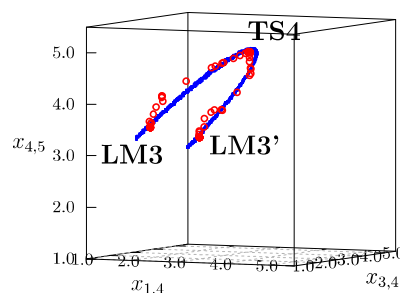


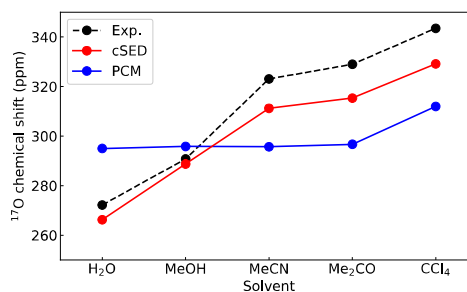
Fig. 5. Path 4 in LJ₆ cluster.

Reprinted from "Distance as coordinate: A distance geometry study on isomerizations of small Lennard-Jones and Au₆⁺ clusters", *Chem. Phys. Lett.*, **780**, 138942, Copyright (2021), with permission from Elsevier

(3) 分子の電子状態を記述する上で、実験との直接的な比較を行いやすい物理量を対象とした方法論の開発に取り組み、溶媒和に伴う電子状態の変化をより定量的に議論できる基盤整備を行った。具体的には量子化学-統計力学を融合した RISM-SCF-SEDD 法に基づいて、NMR 化学シフト(磁気遮蔽)を決定する新しい理論の開発に成功した。さらに電荷分布を適切に扱うことのできる RISM-SCF-cSED に基づく新法を開発し、従来法に比べて数値的安定性を向上させた。

右図は様々な溶媒中における *N*-メチルホルムアミドの酸素のシフトの結果であり、高い精度で実験結果を再現していることがわかる。

水や様々な溶媒中の分子、QM/MM 法による報告があるジアジン類について計算を行い、実験結果とも良い一致が得られた。また実験研究者と共同して、水中のヒドリドを含むアニオン系における化学シフトの解析を行なった。この成果は掲載誌のカバーアートに採用された。



Reprinted with permission from *J. Chem. Phys.* **157**, 204105. Copyright 2022, AIP Publishing. This article may be downloaded for personal use only. Any other use requires prior permission of the author and the AIP Publishing

以上のように、本研究課題を通じて、量子化学、液体の統計力学および関連分野といった幅広い立場から、有用な分子理論を多数開発し、実在する系の分子論的な描像の理解を深めることができた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計20件（うち査読付論文 20件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Nakatani Kaho, Sato Hirofumi	4. 巻 52
2. 論文標題 A Geminal Method Based on the Generalized Electron Pairing Applied to the Heisenberg Model of Hydrocarbons	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 254 ~ 258
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.230022	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takamatsu Akihiko, Higashi Masahiro, Sato Hirofumi	4. 巻 51
2. 論文標題 Free Energy and Solvation Structure Analysis for Adsorption of Aromatic Molecules at Pt(111)/Water Interface by 3D-RISM Theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 791 ~ 795
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.220215	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Imamura Kosuke, Yokogawa Daisuke, Higashi Masahiro, Sato Hirofumi	4. 巻 157
2. 論文標題 Reference interaction site model self-consistent field with constrained spatial electron density approach for nuclear magnetic shielding in solution	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 204105 ~ 204105
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0122326	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakatani Kaho, Higashi Masahiro, Sato Hirofumi	4. 巻 157
2. 論文標題 Extraction of local spin-coupled states by second quantized operators	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 014112 ~ 014112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0092834	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakatani Kaho, Teshigawara Sho, Tanahashi Yuta, Kasahara Kento, Higashi Masahiro, Sato Hirofumi	4. 巻 24
2. 論文標題 Solvation in nitration of benzene and the valence electronic structure of the Wheland intermediate	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 16453 ~ 16461
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cp01699k	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Imamura Kosuke, Higashi Masahiro, Kobayashi Yoji, Kageyama Hiroshi, Sato Hirofumi	4. 巻 126
2. 論文標題 Chemical Shift of Solvated Hydride Ion: Comparative Study with Solvated Fluoride Ion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 3090 ~ 3098
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c00326	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 Yagi Tomoaki, Sato Hirofumi	4. 巻 156
2. 論文標題 Self-consistent construction of grand potential functional with hierarchical integral equations and its application to solvation thermodynamics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 054116 ~ 054116
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0079806	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshida Yuichiro, Sato Hirofumi	4. 巻 780
2. 論文標題 Distance as coordinate: A distance geometry study on isomerizations of small Lennard-Jones and Au ₆ ⁺ clusters	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 138942 ~ 138942
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2021.138942	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakatani Kaho, Higashi Masahiro, Fukuda Ryoichi, Sato Hirofumi	4. 巻 42
2. 論文標題 An analysis of valence electronic structure from a viewpoint of resonance theory: Tautomerization of formamide and diazadiboretidine	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1662 ~ 1669
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26703	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yagi Tomoaki, Sato Hirofumi	4. 巻 154
2. 論文標題 Self-consistent construction of bridge functional based on the weighted density approximation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124113 ~ 124113
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0046630	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshida Yuichiro, Iuchi Satoru, Sato Hirofumi	4. 巻 23
2. 論文標題 A quantum chemical model for a series of self-assembled nanocages: the origin of stability behind the coordination-driven formation of transition metal complexes up to [M12L24]24+	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 866 ~ 877
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0cp04755d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yagi Tomoaki, Sato Hirofumi	4. 巻 153
2. 論文標題 Density functional theory for molecular liquids based on interaction site model and self- consistent integral equations for site?site pair correlation functions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 164102 ~ 164102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0022568	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshida Yuichiro, Yokoi Hayato, Sato Hirofumi	4. 巻 41
2. 論文標題 Energy landscape study of water splitting and H ₂ evolution at a ruthenium(II) pincer complex	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 2240 ~ 2250
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26385	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Imamura Kosuke, Yamazaki Takeshi, Yokogawa Daisuke, Higashi Masahiro, Sato Hirofumi	4. 巻 152
2. 論文標題 Nuclear magnetic shielding of molecule in solution based on reference interaction site model self-consistent field with spatial electron density distribution	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 194102 ~ 194102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0008903	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Imamura Kosuke, Yamamoto Takeshi, Sato Hirofumi	4. 巻 742
2. 論文標題 Coarse-grained modeling of nanocube self-assembly system and transition network analyses	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 137135 ~ 137135
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2020.137135	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yagi Tomoaki, Sato Hirofumi	4. 巻 47
2. 論文標題 An Integral Equation Theory for Two Dimensional Molecular Fluids	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 901 ~ 904
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.180344	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yagi Tomoaki, Sato Hirofumi	4. 巻 39
2. 論文標題 A simple model of planar membrane: An integral equation investigation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 2576 ~ 2581
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25638	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kajita Ken, Nakano Hiroshi, Sato Hirofumi	4. 巻 43
2. 論文標題 A theoretical study on the optical absorption of green fluorescent protein chromophore in solutions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Mol. Simulation	6. 最初と最後の頁 997 ~ 1003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/08927022.2017.1315769	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kasahara Kento, Sato Hirofumi	4. 巻 19
2. 論文標題 Dynamics theory for molecular liquids based on an interaction site model	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 27917 ~ 27929
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7cp05423h	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsumura Yoshihiro, Iuchi Satoru, Sato Hirofumi	4. 巻 20
2. 論文標題 A model electronic Hamiltonian for the self-assembly of an octahedron-shaped coordination capsule	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 1164 ~ 1172
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7cp06094g	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計58件(うち招待講演 12件/うち国際学会 11件)

1. 発表者名 矢木 智章;佐藤 啓文
2. 発表標題 重み付き密度近似に基づく自由エネルギー汎関数の自己無撞着な構成
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高松 晃彦; 福田 良一; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 3D-RISM 理論による Pt(111)面に吸着した芳香族化合物の溶媒和構造解析
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中谷 佳萌; 東 雅大; 福田 良一; 佐藤 啓文
2. 発表標題 非直交軌道の第二量子化演算子による価電子構造と化学結合の解析
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 今村 洸輔; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 溶媒和ヒドリドイオンの化学シフト推定:フッ化物イオンとの比較研究
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 矢木 智章;佐藤 啓文
2. 発表標題 新しい階層型積分方程式による自由エネルギー汎関数の自己無撞着な構成と溶媒和への応用
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中谷 佳萌; 東 雅大; 福田 良一; 佐藤 啓文
2. 発表標題 開殻分子における局在スピンの相関と結合次数の評価
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高松 晃彦; 福田 良一; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 3D-RISM理論を用いた固液界面系における吸着自由エネルギーの評価
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 今村_洸輔; 安池_智一; 佐藤_啓文
2. 発表標題 固体モデル系に対する解析表現可能な複素吸収ポテンシャルの開発
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中谷 佳萌; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 ベンゼンのニトロ化反応における溶媒和とWheiland中間体の価電子構造
3. 学会等名 第43回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高松 晃彦; 福田 良一; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 3D-RISM 理論による金属-水界面の溶媒和構造と吸着自由エネルギーに関する研究
3. 学会等名 第43回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hirofumi Sato
2. 発表標題 Multi-scale couplings for chemical processes at molecular level: quantum chemistry and statistical mechanics
3. 学会等名 Pacifichem (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤啓文
2. 発表標題 凝縮化学系の分子理論
3. 学会等名 神戸大学セミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤啓文
2. 発表標題 配位自己集合過程の分子理論
3. 学会等名 広島大学先進理工系科学研究科セミナー（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 松澤 裕人; 中谷 佳萌; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 RISM-SCF-cSED法を用いたClaisen転位反応における溶媒効果の解析
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木 さら; 今村 洸輔; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 2-Phenylbenzo[b]phospholium saltsの蛍光特性変化に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木 さら; 今村 洸輔; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 共役ホスホール塩の溶液中での構造とその蛍光特性への効果
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中谷 佳萌; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 第二量子化演算子による局所的スピン結合状態の抽出
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐藤啓文
2. 発表標題 凝縮化学系の分子理論
3. 学会等名 第16回分子科学討論会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高松 晃彦; 東雅大; 佐藤啓文
2. 発表標題 3D-RISM理論を用いたPt(111)/水界面における芳香族有機分子吸着過程の自由エネルギー評価
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 今村洸輔; 横川大輔; 東雅大; 佐藤啓文
2. 発表標題 溶媒和を考慮したNMR化学シフト計算: RISM-SCF-cSED法によるアプローチ
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木 さら;今村 洸輔;東 雅大;藤井 香里;木村 佳文;俣野 善博;佐藤 啓文
2. 発表標題 溶液内での 共役ホスホール塩の構造と蛍光特性
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 今村 洸輔;横川 大輔;東 雅大;佐藤 啓文
2. 発表標題 化学シフトに対する顕著な溶媒依存性を再現可能なGIAO-RISM-SCF-cSED法の開発と適用
3. 学会等名 第44回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木 さら;今村 洸輔;東 雅大;藤井 香里;木村 佳文;俣野 善博;佐藤 啓文
2. 発表標題 共役ホスホール塩の構造と光特性における対アニオン・溶媒効果
3. 学会等名 第44回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hirofumi Sato
2. 発表標題 Hybrid approaches of quantum chemistry, statistical mechanics and kinetics for chemical condensed phase
3. 学会等名 APATCC-10 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中谷 佳萌; 東 雅大; 福田 良一; 佐藤 啓文
2. 発表標題 非直交スピン軌道の第二量子化演算子による共鳴構造の解析
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高松 晃彦; 福田 良一; 東 雅大; 佐藤 啓文
2. 発表標題 3D-RISM 理論を用いた表面吸着分子系の溶媒和構造に関する研究
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 矢木 智章; 佐藤 啓文
2. 発表標題 相互作用点モデルによる分子液体の古典密度汎関数理論
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 矢木 智章; 佐藤 啓文
2. 発表標題 結晶界面における溶媒和理論の開発ー分子液体の密度汎関数法によるアプローチー
3. 学会等名 溶液化学研究会若手の会オンラインシンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 矢木 智章; 佐藤 啓文
2. 発表標題 結晶界面における分子液体の古典密度汎関数理論の開発
3. 学会等名 分子科学会 オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 今村洸輔 ; 山崎健 ; 横川大輔 ; 東雅大 ; 佐藤啓文
2. 発表標題 RISM-SCF-SEDD 法の溶液内化学シフト計算への展開
3. 学会等名 分子科学会 オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 矢木智章; 佐藤啓文
2. 発表標題 相互作用点モデルに基づいた分子性液体の古典密度汎関数理論の定式化と自由エネルギー表式
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤啓文
2. 発表標題 分子科学に基づく自己集合過程の理解
3. 学会等名 第6回森野ディスカッション(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hirofumi Sato; Yoshihiro Matsumura; Shuichi Hiraoka; Satoru Iuchi
2. 発表標題 Theoretical Study on Self-assembly process of Octahedron-shaped Molecular Capsule
3. 学会等名 27th International Society of Heterocyclic Chemistry Congress (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hirofumi Sato
2. 発表標題 Chemical Process in aqueous solution: Chemical Reaction, Excitation and Dynamics
3. 学会等名 The 10th Toyota RIKEN international Workshop on Science of Life Phenomena woven by Water and Biomolecules (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 武野傑; 矢木智章; 佐藤啓文
2. 発表標題 振動の効果を取り込んだ分子性液体の積分方程式理論
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 勅使河原翔; 吉田悠一郎; 中農浩史; 佐藤啓文
2. 発表標題 含炭素アルミニウムクラスターAl _n C ₂ -の安定構造の大域的探索
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今村洸輔; 佐藤啓文
2. 発表標題 ナノキューブ自己集合系の粗視化モデル作成と反応過程の解明
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hirofumi Sato
2. 発表標題 Understanding the self-assembly processes: A global and local approach
3. 学会等名 9th conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 矢木智章; 佐藤 啓文
2. 発表標題 分子液体の古典密度汎関数理論: 相互作用点モデルに基づいた定式化と自由エネルギー表式
3. 学会等名 第42回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hirofumi Sato
2. 発表標題 Theoretical chemistry for a group of molecules: electronic structure of solvated molecules and self-assembly
3. 学会等名 Taiwan-Japan Workshop on Theoretical Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 比嘉未香子;東雅大;佐藤啓文
2. 発表標題 TCNQの光物性の溶媒依存性に関する理論的研究
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuichiro YOSHIDA; Hayato Yokoi; Hirofumi Sato
2. 発表標題 Hierarchical Understanding of Water Splitting and H ₂ Evolution Mechanisms by a Ruthenium(II) Pincer Complex
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田悠一郎;井内哲;佐藤啓文
2. 発表標題 (sp)電子系の有効CIハミルトニアン
3. 学会等名 研究会「凝縮系の理論化学」
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hirofumi Sato
2. 発表標題 Theoretical study of chemical reactions in solution phase using a variety of approaches
3. 学会等名 35th International Conference on Solution Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 矢木 智章;佐藤 啓文
2. 発表標題 基本測定理論に基づく分子性液体の自由エネルギー汎関数の改善とその界面物性への応用
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomoaki Yagi; Hirofumi Sato
2. 発表標題 An improvement in the free energy functional for the classical liquids based on the fundamental measure theory and its application to the liquid-vapor coexistence curve
3. 学会等名 Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hirofumi Sato;Yoshihiro Matsumura;Yuichiro Yoshida;Shuichi Hiraoka; Satoru Iuchi
2. 発表標題 Theoretical study on dynamics and structure of self-assembly process
3. 学会等名 Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤啓文
2. 発表標題 分子集団の理論化学：溶媒和・拡散・自己集合
3. 学会等名 東京大学 第19回超分子化学セミナー（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤啓文
2. 発表標題 凝縮系の理論化学：分子集団の理論
3. 学会等名 CAMMフォーラム（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hirofumi Sato
2. 発表標題 Chemical reaction, excitation and self-assembly at molecular level
3. 学会等名 Computational Sciences Workshop 2019 (CSW2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 勅使河原 翔; 吉田 悠一郎; 佐藤 啓文
2. 発表標題 広域的構造探索法を用いた含炭素アルミニウムアニオンクラスターの理論的研究
3. 学会等名 第16回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kosuke Imamura; Hirofumi Sato
2. 発表標題 Coarse-grained model of nanocube based on the analysis of all atom molecular dynamics simulation
3. 学会等名 第16回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 武野傑; 矢木智章; 佐藤啓文
2. 発表標題 分子振動解析における座標変換
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今村洸輔; 佐藤啓文
2. 発表標題 歯車状両親媒性分子の自己集合モデル
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 笠原健人; 佐藤啓文
2. 発表標題 溶液中における一分子に対する時間依存分布関数
3. 学会等名 第40回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 TESHIGAWARA Sho; TANAHASHI Yuta; KASAHARA Kento; SATO Hirofumi
2. 発表標題 Quantum Chemical Computations on Benzene Nitration in Aqueous Solution
3. 学会等名 第33回化学反応討論会(国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 笠原 健人;佐藤 啓文
2. 発表標題 分子性液体のSmoluchowski方程式を用いた一分子拡散の記述
3. 学会等名 第20回理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 棚橋祐太;笠原健人;佐藤啓文
2. 発表標題 LiTFSI高濃度水性電解液の溶媒和構造に関する理論的研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	井内 哲 (IUCHI Satoru) (50535060)	名古屋大学・情報学研究科・助教 (13901)	

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
---------	---------