

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 3 年 5 月 19 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K05021

研究課題名(和文)ダイレクト・アブイニシオMD法による微視的溶媒和クラスター反応の実時間追尾

研究課題名(英文) Direct Ab-initio Molecular Dynamics (MD) Study on the Ionization and Electron Capture Dynamics of Micro-solvated Clusters

研究代表者

田地川 浩人 (Tachikawa, Hiroto)

北海道大学・工学研究院・助教

研究者番号：10207045

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：化学反応は、少数の溶媒分子の存在により大きな影響を受ける場合が多い。微視的溶媒和クラスターは、少数の溶媒和分子によって取り囲まれた分子(溶質)からなり、溶質の周りの溶媒を部分的に切り出したナノスケールの溶液といえる。本研究では、ダイレクト・アブイニシオ分子動力学法を用いて、微視的溶媒和クラスター内での反応ダイナミクスを理論的に研究した。特に、光照射後の反応ダイナミクスを実時間で追尾し、反応への微視的溶媒和の効果を理論的に予測した。また、単一分子デバイスの電導性への微視的溶媒和の効果等について研究した。その結果、微視的溶媒和により反応のメカニズムが大きな影響を受けることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

微視的溶媒和クラスターは、分子が少数の溶媒分子に取り囲まれた集合体であり、いわばナノスケールの溶液といえる。最近、クラスターの大きさを選別した実験が可能となってきた。これに対し、理論的なアプローチは、有力な方法論が無いため極めて少ない。本研究で開発するダイレクト・アブイニシオ分子動力学法は、純理論的にクラスターの反応を追尾する有力な計算方法である。本研究課題では、この計算法を発展させるとともに、微視的溶媒和クラスター内での光化学反応を理論的に研究した。これにより、新しい反応を設計することが可能となり、新規の薬品、および電子材料の開発への発展が期待される。

研究成果の概要(英文)：The reaction dynamics of micro-solvated molecules and clusters have been investigated by means of direct ab initio molecular dynamics (AIMD) method. The purposes of this study are to elucidate the dominant factor on the mechanism in the micro-solvated clusters and the effects of micro-solvation on the product reaction channels. The reaction systems used in the present study were water clusters, hydrated biphenyl molecule, and DNA base pair. It was found that the micro-solvation enhances efficiently the proton transfer reactions following the ionization and photo-irradiation.

研究分野：量子化学

キーワード：理論反応設計 理論分子設計 電子捕捉反応 光誘起反応 媒質効果 プロトン移動 実時間 反応追尾

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。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

化学反応は、少数の溶媒分子の存在により大きな影響を受ける場合が多い。微視的溶媒和クラスターは、少数の溶媒分子によって取り囲まれた分子(溶質)からできるクラスターであり、溶質の周りの溶媒を部分的に切り出した、いわばナノスケールの溶液といえる。最近、クラスターサイズを選別した微視的溶媒和クラスターを任意に生成することが可能となっており、質量分析法およびレーザー分光法を組み合わせることによって、その反応ダイナミクスについて、詳細な実験が可能となってきた。これに対し、微視的溶媒和クラスターの反応ダイナミクスに関する理論的なアプローチは極めて少ない。従来の理論的研究のほとんどは、溶媒和構造および電子状態等の静的な情報(時間を含まない情報)に留まっており、本研究で対象とする「微視的溶媒和クラスターの実時間反応ダイナミクスの理論説明」は、世界的にほとんど行われていない現状にある。

本研究では、研究代表者・田地川が開発したダイレクト・アブイニシオ分子動力学(AIMD: Ab-initio molecular dynamics)法を用いて、微視的溶媒和クラスター内での反応ダイナミクスを理論的に研究した。特に、光照射後の反応ダイナミクスを実時間で追尾することにより、反応の詳細なメカニズムを解明し、「反応ダイナミクスへの微視的溶媒和の効果」を理論的に予測した。

2. 研究の目的

本研究課題では、ダイレクト AIMD 法を用いて、溶媒和クラスター内での反応ダイナミクスを理論的に研究した。特に、光照射後の反応ダイナミクスを実時間で追尾することにより、反応の詳細なメカニズムを解明し、反応ダイナミクスへの微視的溶媒和の効果を実験的に予測した。

ダイレクト・アブイニシオ MD 法は、反応の時間毎に全自由度を考慮したエネルギー勾配を計算しながらトラジェクトリーを計算する方法であり、現在のところ、溶媒和クラスターのダイナミクスを全自由度で計算する唯一の方法である。実験では反応の最終生成物しか観測できないが、ダイレクト・アブイニシオ MD 法では、フェムト秒オーダーの実時間で追尾が可能であるため、反応中間体の構造、電子状態、および寿命等、実験からは得られない詳細な反応のメカニズムを解明できる利点を持つ。

本研究では、微視的溶媒和クラスターの動的構造を解明するとともに、(1)イオン化ダイナミクス、(2)電子捕捉ダイナミクス、および、(3)光励起反応ダイナミクスを理論的に解明した。

3. 研究の方法

微視的溶媒和クラスターは、化学反応への溶媒効果を解明するボトムアップ的方法として注目を浴びている反応場である。しかしながら、溶媒クラスター内に閉じ込められた分子の光によるイオン化実時間ダイナミクスについての情報は極めて限られている。これは、クラスター内のイオン化では、様々な反応チャンネルを経て反応生成物へ向かうため、実験的に、その複合的な反応過程を解析するのが困難であること、および反応が極めて高速のため実験的には生成物しか観測できない理由による。

本研究では、微視的溶媒和クラスターのイオン化(または電子捕捉)後の実時間ダイナミクスをダイレクト AIMD 法を用いて理論的に研究し、(1)反応開始直後から生成系へ至る全過程を実時間で追尾し、動的メカニズムを解明する、(2)反応チャンネルを支配している因子を解明する、および(3)これらの反応チャンネルを制御する方法の開発(どのような実験条件であれば、単一チャンネルのみを取り出せるか?)の解明を目指した。ダイレクト AIMD 法の概念図を図 1 に示す。この方法により、水クラスター、アンモニア・クラスター、DNA 塩基対、フェノール、CO₂クラスター等の微視的溶媒和クラスターのイオン化に伴う反応ダイナミクスを理論的に研究した。

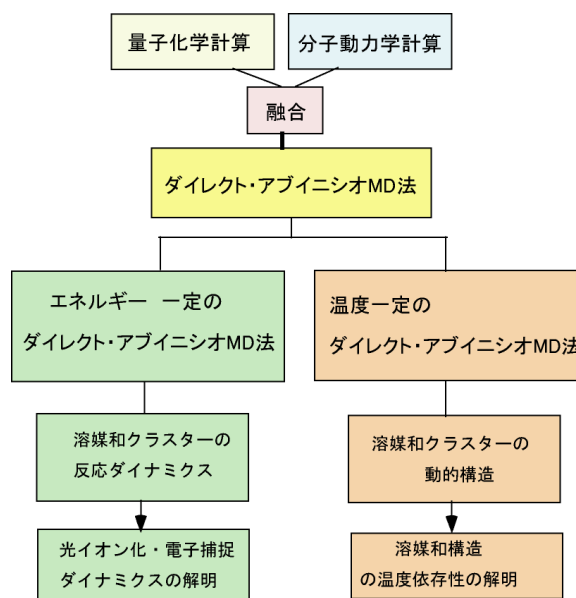


図 1. ダイレクト AIMD 法の説明と本研究の概念図。量子化学計算と分子動力学(MD)計算を融合したハイブリッドな計算方法であり、時間依存による反応過程を追尾可能である。

水クラスター、アンモニア・クラスター、DNA 塩基対、フェノール、CO₂クラスター等の微視的溶媒和クラスターのイオン化に伴う反応ダイナミクスを理論的に研究した。

4. 研究成果

(1) CO₂-H₂O クラスターへの光照射効果

二酸化炭素の水クラスターCO₂-H₂Oへの紫外線、および宇宙線照射効果は、宇宙における化学進化の初期化学反応のモデルとして重要である。本研究では、ダイレクト AIMD 法により、このクラスターの光照射後の反応ダイナミクスについて理論的に明らかにすることを目的とした。その結果、光照射効果について、以下の事を明らかにした。CO₂-H₂O クラスターのイオン化状態、CO₂(H₂O)_n⁺には、基底状態の上にエネルギーの低いイオン化(励起)状態が存在する(図2)。ダイレクト AIMD 計算の結果、基底状態へのイオン化では、水クラスター内で、20 fs の高速でプロトン移動が起こり、励起状態では、CO₂が水分子から OH ラジカルを引き抜き、極めて活性な HCO₃ ラジカルを生成することを明らかにした。さらにこの手法を、CO-H₂O、および NH₃-H₂O クラスターへ拡張し、宇宙における化学進化の反応のモデルを提出した。

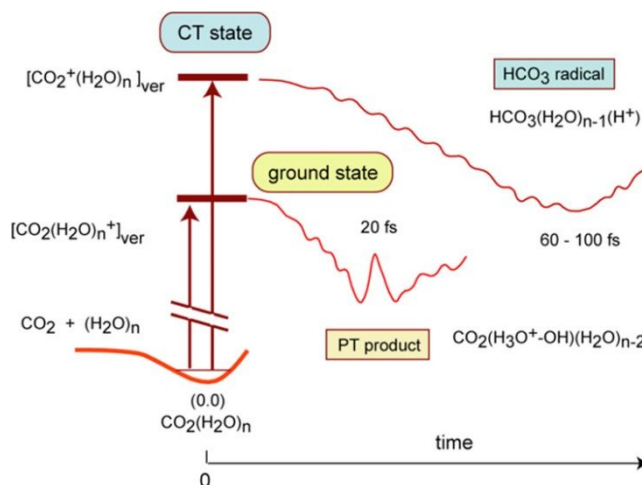


図 2. ダイレクト AIMD 法によって明らかにした「CO₂-H₂O クラスターへの光照射効果」。[田地川: *J. Phys. Chem. A*, **123**, 4743-4749 (2019).]

(2) アンモニア・クラスターへの光照射効果

アンモニアは最近、水素貯蔵分子、および火力発電燃料として注目を集めている分子である。ダイレクト AIMD 法は、このような多体系の反応ダイナミクスを有効に取り扱うことができる計算方法である。本研究では、アンモニア・クラスター(NH₃)_n (n=2-6)の光反応ダイナミクスをダイレクト AIMD 法により研究した。その結果、(NH₃)_nは光イオン化後、30-50 fs でプロトン移動が起こることを示した。また、プロトン移動の速さは、クラスターサイズに依存し、サイズが大きくなることによりプロトン移動速度が速くなり、n=5-6 でほぼ一定になることを明らかにした。

(3) ダイレクト AIMD 法の新規材料開発への応用

微視的溶媒和とクラスターの反応では、バルクでは見られない新たな反応経路が開く可能性がある。材料化学への応用例として、本研究では、ベンゼンクラスターより構成される電子スイッチングデバイスを理論設計した。図3にその概念図を示す。中性状態では、ベンゼン同士が、C-H/π相互作用で弱い結合をしているが、ホール捕捉後に、高速でパイスタッキングが起き、ベンゼン環を通してホール移動が起こることを発見した。また、デバイスへの残存水(H₂O)が、スタッキング速度を加速することを明らかにした。

これらの研究、およびこれまでの研究の集積により、ダイレクト AIMD 法は、微視的溶媒和系の新規な反応を予測可能であることが示唆された。

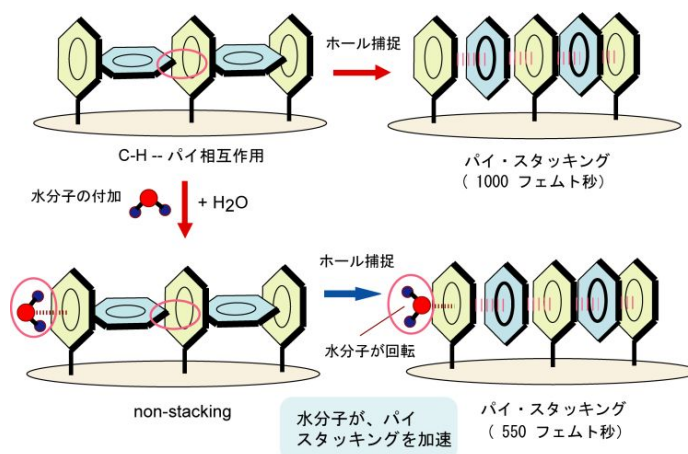


図 3. ダイレクト AIMD法の電子材料開発への応用例。ベンゼン系デバイスがホール捕捉すると、パイスタッキングが起き、ホール移動が起きる。微視的溶媒和する水分子は、スイッチング速度を加速する。[田地川: *Sci. Rep.*, **9**, 2377 (2019).]

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 0件 / うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Tachikawa Hiroto	4. 巻 123
2. 論文標題 Activation of CO ₂ in Photoirradiated CO ₂ -H ₂ O Clusters: Direct Ab Initio Molecular Dynamics (MD) Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 4743 ~ 4749
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b03823	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 Tachikawa Hiroto, Iyama Tetsuji	4. 巻 123
2. 論文標題 Mechanism of Hydrogen Storage in the Graphene Nanoflake:Lithium-H ₂ System	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 8709 ~ 8716
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b01152	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 Tachikawa Hiroto, Iyama Tetsuji	4. 巻 124
2. 論文標題 Proton Transfer Reaction Rates in Phenol-Ammonia Cluster Cation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 7893 ~ 7900
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.0c05688	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 Kawabata Hiroshi, Tachikawa Hiroto	4. 巻 58
2. 論文標題 Molecular orbital studies of the initial process of gallium oxide chemical vapor deposition: micro-hydrolysis of triethylgallium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 061010 ~ 061010
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab2227	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 Tachikawa Hiroto, Kawabata Hiroshi	4. 巻 124
2. 論文標題 Hydrogen Dissociation Dynamics from Water Clusters on Triplet-State Energy Surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 8421 ~ 8428
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.0c07109	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 Tachikawa Hiroto, Kawabata Hiroshi	4. 巻 97
2. 論文標題 Additions of fluorine atoms to the surfaces of graphene Nanoflakes:A density functional theory study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Solid State Sciences	6. 最初と最後の頁 106007 ~ 106007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.solidstatesciences.2019.106007	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 124
2. 論文標題 Proton Transfer vs Complex Formation Channels in Ionized Formic Acid Dimer: A Direct Ab Initio Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 3048 ~ 3054
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.0c01729	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 Kawabata Hiroshi, Tachikawa Hiroto	4. 巻 58
2. 論文標題 Hydrofluorination to C60 fullerene and its electronic structures in the gas phase using density functional theory study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 121001 ~ 121001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab509a	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 Kawabata Hiroshi, Tachikawa Hiroto	4. 巻 59
2. 論文標題 A density functional theory study on the carbon defect in a graphene nano-flake surface promoting hydrogenation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 025508 ~ 025508
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab6be3	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 Tachikawa Hiroto, Haga Kazuko, Watanabe Sadayuki, Yamada Kazuo	4. 巻 124
2. 論文標題 Local Structures and Electronic States of C-S-H-Sodium-H2O Interface: NMR and DFT Studies	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 5672 ~ 5680
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b11302	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 124
2. 論文標題 Intramolecular Reactions in Ionized Ammonia Clusters: A Direct Ab Initio Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 1903 ~ 1910
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b11122	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 691
2. 論文標題 Mechanism of Li storage on graphene nanoflakes: Density functional theory study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Surface Science	6. 最初と最後の頁 121489 ~ 121489
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.susc.2019.121489	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 田地川 浩人	4. 巻 78
2. 論文標題 宇宙の化学反応を実時間で追う：ダイレクト・アブイニシオ分子動力学法によるアプローチ	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 低温科学	6. 最初と最後の頁 141 ~ 154
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 福澄 孝博, 田地川 浩人	4. 巻 78
2. 論文標題 星間分子 PAH と分子, およびラジカルの相互作用: 量子化学的解明	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 低温科学	6. 最初と最後の頁 155 ~ 164
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tachikawa Hiroto	4. 巻 679
2. 論文標題 Methyl radical addition to the surface of graphene nanoflakes: A density functional theory study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Surface Science	6. 最初と最後の頁 196 ~ 201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.susc.2018.09.013	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 Tachikawa Hiroto, Iura Ryoshu, Kawabata Hiroshi	4. 巻 9
2. 論文標題 Water-accelerated π -Stacking Reaction in Benzene Cluster Cation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 2377
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-39319-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 TACHIKAWA Hiroto, MIYAZAWA Yoshiyuki, IURA Ryosho	4. 巻 3
2. 論文標題 Timescale of π -Stacking Formation in a Benzene Trimer Cation Formed by Ionization of the Parent Neutral Trimer: A Direct Ab Initio Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ChemistrySelect	6. 最初と最後の頁 1113 ~ 1119
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/slct.201702663	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tachikawa Hiroto	4. 巻 122
2. 論文標題 Jahn-Teller Effect of the Benzene Radical Cation: A Direct ab Initio Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 4121 ~ 4129
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.8b00292	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 Tachikawa Hiroto, Iyama Tetsuji	4. 巻 540
2. 論文標題 Hydration effects on proton transfer reactions in the catalytic triad Ser-His-Glu	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 111003 ~ 111003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2020.111003	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 Tachikawa Hiroto, Izumi Yoshiki, Iyama Tetsuji, Azumi Kazuhisa	4. 巻 6
2. 論文標題 Molecular Design of a Reversible Hydrogen Storage Device Composed of the Graphene Nanoflake-Magnesium-H ₂ System	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 7778 ~ 7785
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c00243	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計26件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 8件）

1. 発表者名 Hiroto Tachikawa, Tetsuji Iyama
2. 発表標題 Mechanism of Hydrogen Storage in the Graphene Nanoflake-Lithium-H ₂ System
3. 学会等名 ISPlasma 2020 & IC-PLANTS 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroshi Kawabata, Tetsuji Iyama, Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Mechanism of Adsorption/Desorption of H ₂ to the Graphene Surface
3. 学会等名 ISPlasma 2020 & IC-PLANTS 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 泉善貴, 田地川浩人, 安住和久
2. 発表標題 金属をドーピングしたグラフェンナノフレークの水素貯蔵メカニズム
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2021年冬季研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井山哲二, 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 アルカリ金属をドーピングしたグラフェンナノフレークによる水素貯蔵機構の理論解明
3. 学会等名 第14回酸化グラフェンシンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 井山哲二, 田地川浩人
2. 発表標題 グラフェンナノフレークの水素貯蔵メカニズム: 理論的アプローチ
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2020年冬季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 井浦亮周, 田地川浩人, 安住和久
2. 発表標題 ホール捕捉によって誘起されるパイスタッキングへのヘテロ原子の効果
3. 学会等名 第9回CSJ化学フェスタ2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井山哲二, 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 リチウム-グラフェン系による水素貯蔵メカニズムの理論解明
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井浦亮周, 田地川浩人
2. 発表標題 ホール捕捉によって誘起されるパイスタッキング・ジャンクションの理論設計
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2020年冬季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 カーボンナノチューブ上のリチウムの拡散メカニズム: 密度汎関数計算
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2020年冬季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 井山哲二, 田地川浩人
2. 発表標題 フッ素化グラフェンナノフレークによる水素貯蔵機構の理論解明
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2020年冬季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroyuki Tachikawa, Tetsuji Iyama
2. 発表標題 Density Functional Theory (DFT) Study on the Interaction of H ₂ with Lithium Doped Graphene Surface
3. 学会等名 ISPlasma 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tetsuji Iyama, Hiroshi Kawabata, Hiroyuki Tachikawa
2. 発表標題 Density Functional Theory (DFT) Study on the Mechanism of Adsorption/Desorption of H ₂ to the Graphene Surface
3. 学会等名 ISPlasma 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 DNA塩基のプロトン移動を利用した実時間スイッチング素子の理論設計
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井山哲二, 田地川浩人
2. 発表標題 リチウムをドーブしたグラフェン・ナノフレークの水素貯蔵メカニズム・理論的アプローチ
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福澄孝博, 田地川浩人
2. 発表標題 宇宙氷表面に吸着した分子ダイマーの光イオン化ダイナミクス: ダイレクト・アブイニシオMD法によるアプローチ
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井浦亮周, 田地川浩人
2. 発表標題 ベンゼンクラスターのホール捕捉によって誘起されるパイスタッキング・ダイ
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroshi Kawabata, Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Adsorption/Desorption of Hydrogen Molecule to the Surface of Graphene Nanoflakes
3. 学会等名 International Microprocesses and Nanotechnology Conference (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ryoshu Iura, Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Molecular Design of High-performance π -Stacking Materials
3. 学会等名 International Microprocesses and Nanotechnology Conference (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井山哲二, 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 グラフェン表面のリチウム原子(またはフッ素原子)への水素吸着に関する理論的研究
3. 学会等名 第41回フッ素化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井浦亮周, 田地川浩人, 安住和久
2. 発表標題 ホール捕捉によって誘起されるパイスタッキングの機構解明
3. 学会等名 第8回CSJ化学フェスタ2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 川畑 弘, 田地川浩人
2. 発表標題 DNA塩基のプロトン移動を利用したスイッチング素子の理論設計: ダイレクト・アブイニシオMD法によるアプローチ
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 福澄孝博, 田地川浩人
2. 発表標題 宇宙空間の氷表面に吸着した分子の光イオン化ダイナミクス: ダイレクト・アブイニシオMD法によるアプローチ
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 井山哲二, 田地川浩人
2. 発表標題 グラフェン表面へ吸着した金属による水素貯蔵機構の理論解明
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 井山哲二, 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 グラフェン-リチウム-水素の相互作用に関する理論的研究
3. 学会等名 第25回クロマトグラフィーシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tetsuji Iyama, Takahiro Fukuzumi, Hiroshi Kawabata, Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Electronic States of Hydrogen Added Carbon Materials: Density Functional Theory (DFT) Study
3. 学会等名 ISPlasma 2018 & IC-PLANTS 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tetsuji Iyama, Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Interaction of H2 with Metal Atoms on Graphene Surface: Density Functional Theory (DFT) Study
3. 学会等名 ISPlasma 2018 & IC-PLANTS 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

北大 田地川 HP https://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/elemt/tachikawa/index.htm プレスリリース 北海道大学 ベンゼンクラスターが超高速デバイスになることを理論予測～「クラスター分子デバイス」分野の開拓に期待～ https://www.hokudai.ac.jp/news/190306_pr.pdf Ushering in ultrafast cluster electronics https://www.global.hokudai.ac.jp/blog/ushering-in-ultrafast-cluster-electronics/
--

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
英国	Bristol University			
スウェーデン	Linkoping University			