

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 4 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18K05274

研究課題名(和文) プロトン共役多電子移動反応を触媒するポリオキソメタレートの開発原理の研究

研究課題名(英文) Study on the design principles for polyoxometalates that catalyze proton-coupled multi-electron transfer reactions

研究代表者

枝 和男 (Eda, Kazuo)

神戸大学・理学研究科・准教授

研究者番号：00193996

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)：プロトン移動と共役した多電子移動反応を仲介・促進する新たなケギン型あるいはその拡張型POMを開発する理論的な設計指針を構築することを目的として、第一原理計算により、ケギン型POM形成反応の主要な要素反応 dioxo型XW6六員環形成反応、monooxo型XW6六員環への骨格組換反応、3量体POM(キャップ部構造)付加反応の最小エネルギー経路とそれらに及ぼす、ヘテロ原子Xや溶媒の誘電率の影響を調べた。そして、ケギン型POM形成に関わる要素反応の制御指針の詳細を明らかにすることができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究計画で行われた研究は、プロトン移動と共役した多電子移動反応を仲介・促進する新たなケギン型あるいはその拡張型POMを開発する理論的な設計指針を与えるもので、持続可能なエネルギー社会を実現する技術を開発する上で重要である。そして、そればかりではなく、第一原理計算に基づいてPOM形成反応の全容を明らかにする、このような研究はこれまで行われたことはないため、今後様々なPOMの生成反応について同様の解析が行われ、データ蓄積が進めば、新規のPOM合成法の開発のための有効な支援に繋がることが期待される。

研究成果の概要(英文)：Aiming at constructing a theoretical design principles for developing a new Keggin-type or its extended POM that mediates and promotes a multi-electron transfer reaction coupled with proton transfer, the minimum energy paths, and the effects on them of the heteroatom (X) and the dielectric constant of the solvent were investigated by the first-principles calculations, for the three main elemental reactions of the bottom-up formation reaction of Keggin-type POMs: (1) the formation reaction of the dioxo-type six-membered XW6 ring, (2) the reconstruction reaction into the monooxo-type six-membered XM6 ring and (3) the addition reaction of the trimeric POM (cap part) structure. Then, we have succeeded to clarify the details of the control principles for the elemental reactions for the formation of Keggin-type POMs.

研究分野：無機材料化学

キーワード：ポリオキソメタレート 多電子移動反応 プロトン共役電子移動反応 生成反応 量子化学計算

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

(1) 化石燃料の枯渇問題に直面する現代において持続可能なエネルギー社会を実現する技術の開発・確立が急がれる。そのような技術として、燃料再生反応と言える  $\text{CO}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- \rightleftharpoons \text{C} + 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{C} + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- \rightleftharpoons \text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{CO}_3 + 6\text{H}^+ + 6\text{e}^- \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{OH} + 2\text{H}_2\text{O}$  などのプロトン移動を伴う多電子移動反応を触媒する安定な物質を開発することは重要である。ケギンやその拡張型ケギン型ポリオキシメタレート (POM) はアルコールやメタクリル酸合成のための実用触媒として現在でも工業的に重要な触媒であるが、これらは構造を変えることなく多数のプロトンや電子を安定に受容できるため、プロトン移動と共役した多電子移動反応を仲介する触媒としても有望な候補である。

(2) 最近我々は、ケギン型 POM イオン  $[\text{XW}_{12}\text{O}_4]^{z-}$  に関して 中性溶媒中での 1 電子移動反応や酸性溶媒中でのプロトン共役 2 電子移動反応の酸化還元電位がヘテロ原子  $X$  によって決まる  $\mu_4\text{-O-W}$  結合の結合原子価  $s$  に線形依存すること 結合原子価  $s$  の増加に伴って起こる電位逆転により、イオンの二つのプロトン共役 2 電子移動反応がプロトン共役 4 電子移動反応へ転換すること イオンのプロトン化定数も結合原子価  $s$  と相関をもち、プロトン共役 4 電子移動反応の発現に関わることを明らかにした[引用文献 と]。これらのことは、高い結合原子価  $s$  を実現する性質をもち、安定にケギン型 POM を形成する  $X$  原子を見いだす方法を明らかにすることができれば、プロトン移動と共役した 4 電子以上の多電子移動反応を仲介・促進できる新たな POM を開発できることを意味する。

(3) 上述の我々の研究や先行して行った我々の第一原理計算を用いた研究[引用文献]からそのような多電子移動を起こすのに適した  $X$  原子はイオン半径が大きく、イオン電荷が小さいカチオンであることが予想されている。しかし、ケギン型 POM イオンの外骨格のサイズはヘテロ原子の種類によらずほぼ一定であるため、ケギン型 POM 骨格へのヘテロ原子の取り込まれやすさや骨格の安定性にとって適正なヘテロ原子のサイズが存在する。そして、本研究で目指す多電子移動を可能にするヘテロ原子はその適正サイズから外れたものであり、その合成は非常に難しいものになると予想される。

(4) これまでの研究でケギン型 POM の生成のし易さは、dioxo 型環状 6 量体 (アンダーソン型 POM) と mono-oxo 型環状 6 量体 (ケギン型のベルト部骨格) との間の分子内脱水縮合・加水分解反応による化学平衡がどちらに傾くかによって決まり、その平衡は溶媒の誘電率などによっても変わることを見出し[引用文献]、この反応に及ぼす  $X$  原子と溶媒の効果を詳細に調べることで、どのような  $X$  原子のケギン型 POM がどのような溶媒中で安定に生成するのかを明らかにできると考える。

### 2. 研究の目的

本研究計画の目的は、持続可能なエネルギー社会の実現に資する技術の開発を目指し、申請者らが最近ケギン型 POM イオン  $[\text{XW}_{12}\text{O}_4]^{z-}$  ( $X=\text{S}, \text{P}, \text{As}, \dots$ ) で見出した「 $X$  原子によって決まる  $\mu_4\text{-O-W}$  結合の結合原子価  $s$  と相関したプロトン共役多電子移動反応の発現」のメカニズムと「ケギン型 POM 構造の生成しやすさを決める反応」へ及ぼす  $X$  原子と溶媒の効果を量子化学計算などに基づいて明らかにし、プロトン移動と共役した多電子移動反応を仲介・促進する新たなケギン型あるいはその拡張型である  $[\text{X}_2\text{M}_{18}\text{O}_{61}]^{z-}$ ,  $[\text{X}_2\text{M}_{18}\text{O}_{62}]^{z-}$ ,  $[\text{X}_4\text{M}_{30}\text{O}_{103}]^{z-}$ ,  $[\text{X}_4\text{M}_{30}\text{O}_{104}]^{z-}$  ( $M=\text{W}, \text{Mo}$ ) などの POM の開発に繋がる理論的な設計指針を構築することである。

### 3. 研究の方法

(1) 計算機実験：構造最適化計算、第一原理電子状態計算、最小エネルギー経路 (MEP) の探索計算は NTCHEM を用いて計算レベル B97XD/Def2-SVP で行った。また W および Cd 原子については有効内核ポテンシャルを使用した。溶媒効果 (溶媒の誘電率) を織り込んだ計算を行う場合は、COSMO-RS を用いて行い、比誘電率 35, 49, 78 について計算した。計算で扱った系は複雑で、しかも重原子を含むため、MEP 探索のために使用する Nudged Elastic Band (NEB) 法による計算は収束しにくい。そのため、この計算のしきい値は Gaussian の loose に相当する ThrGMax = 0.0025 au とした。計算は、本研究計画の経費で購入した 2 台の (24 コアおよび 40 コア) タワー型計算機と RCCS (分子科学研究所) のスーパーコンピュータ (NEC LX 406Rh-2) を利用し、並列計算により実施した。反応速度解析を行う場合は、NEB 法により得られた鞍点近傍の構造をもとに Gaussian16 の Synchronous Transit-Guided-Quasi-Newton (STQN) 法の QST3 により遷移状態を探した。得られた遷移状態は、虚数振動数が一つの鞍点で、Gaussian16 の Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) 計算により目的反応の遷移状態であることは確かめられた。反応物と遷

移状態の熱化学解析は Gaussian16 を用い、完全気体モデルで行い、得られた熱力学量を用いて反応速度解析を行った。電子密度解析や結合軌道解析は自然結合軌道解析プログラム NBO6 を用いて行った。

(2) 実実験：上述したように本研究で目指す多電子移動を可能にするヘテロ原子を取り込んだケギン型 POM イオンの合成は難しいものになると予想される。そのため、合成能力の高い方法として水熱合成法での合成を検討した。機能性金属有機構造体 (MOF) の合成などで POM を用いた水熱法による合成の例は多少報告されているが、POM の水熱合成に関する系統的な研究はなされていない。そこで、本研究では、まず、水熱条件下でのケギン型 POM の生成領域に及ぼすヘテロ原子の影響を調べるため、ケギン型 POM 構造の中心にヘテロ原子を持たないケギン型 POM として知られるメタタングステン酸イオン ( $[H_2W_{12}O_4]^{4-}$ ) とヘテロ原子源を水熱合成用容器に封入して水熱処理し、ケギン型 POM の生成領域の温度と pH による変化を調べた。沈殿剤にはテトラブチルアンモニウムブロミド (TBA)Br を用い、水熱処理の際、一緒に封入した。封入液の pH は HCl や NaOH を加えて調整し、全液量は容器体積の半分の 14 mL とした。処理温度と処理時間は 80~200 と 30 分~3 日間の範囲で調べた。生成試料は濾過・水洗・乾燥後、赤外吸収法、粉末 X 線回折法、X 線光電子分光法 (XPS) 法により調べられた。

また、我々の予測から多電子移動 (4電子移動) を示すと考えられる新規のケギン型 POM の合成を目指して、 $Na_2WO_4 \cdot 2H_2O$  と  $Cd(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$  の水熱処理によるボトムアップ型の  $[Cd_1W_{12}O_{40}]^{6-}$  の水熱合成も試みた。この合成では、沈殿剤の TBABr を水熱処理後の上澄み溶液に加えることで、目的の生成物を得た。

#### 4. 研究成果

(1) 計算機実験 1：本研究で行った膨大な量の第一原理計算により、ボトムアップ型のケギン型 POM 形成反応の主要な要素反応[ アンダーソン型 POM の形成反応, dioxo型環状6量体 (アンダーソン型 POM) から mono-oxo型環状6量体 (ケギン型ベルト部骨格) への骨格組換反応, ケギン型のベルト部骨格への3量体 POM (キャップ部構造) 縮合付加反応] に関して、ヘテロ原子の種類や溶媒の誘電率が反応の反応物 (始状態構造)・生成物 (終状態構造)・MEP・反応障壁などに及ぼす影響を調べることができた。特に要素反応 の反応に関しては、1 段で進む (3 量体 POM との縮合) 反応と逐次 3 段で進む (3 個の単量体オキソメタレート (OM) との縮合) 反応の両方についても明らかにすることができた。このような第一原理計算に基づいて POM 形成反応の全容を明らかにする研究はこれまで行われたことはない。そして、この研究によりケギン型 POM 形成に関わる要素反応の制御指針の詳細を明らかにすることができた。

例えば、上述の研究背景でケギン型 POM の生成反応の制御の上で重要であると述べた要素反応 の POM 環状6量体の骨格組換反応の場合、始状態であるアンダーソン型 POM の構造は、 $M_6O_{24}$  六員環中にヘテロイオンが挿入された構造と言うよりは、 $M_6O_{18}$  六員環骨格に  $X(OH)_6$  中心ユニットが挿入された構造であると見なせる (図1)。そして、その構造での六員環骨格と中心ユニットの相互作用は、 $X=Si^{4+}$  の場合、約 2500  $kJ mol^{-1}$  の安定化を受ける。この相互作用は、ヘテロ原子のイオン半径とイオン電荷に依存して変化する。

また、その終状態 (ケギン型ベルト部骨格) の構造は、ヒドロキシド型六員環ではなく、オキシド・アクア型六員環の中心に  $[X^{n+}O_3]^{n-6}$  ユニットが取り込まれた構造と見做せる。そして、その構造はヘテロ原子のイオン電荷に応じて変形する。すなわち、中心ユニットの  $X$  が  $Ni^{2+}$  を除いて +2~+4 価の場合、 $M_6O_{18}$  六員環骨格はその 3 箇所の W-O-W 角が小さくなり、トリゴナルライスポール型 (trb) 形状をとる (図2)。この形状の発現は、三角形の中心ユニットが  $M_6O_{18}$  六員環に取り込まれることによって起こる。他方、+5 と +6 価の場合、中心ユニットは  $M_6O_{18}$  六員環平面から外に追い出された位置にあり、六員環はすべての W-O-W 角が  $10^\circ$  以内の差で等しいラウンドライスポール型 (rrb) 形状をとる (図2)。そして第一原理計算に基づく  $M_6O_{18}$  六員環が trb 型をとるには、rrb 型に比べて約数  $kJ mol^{-1}$  のエネルギーが必要である。また  $M_6O_{18}$  六員環中の W は、大きな正電荷を持ち、 $[X^{n+}O_3]^{n-6}$  ユニットが  $M_6O_{18}$  六員環に取り込まれると中心ユニットの三つのオキシド配位子の負電荷との間で静電的相互作用によりエネルギー的な利得を得る。したがって、中心ユニットが  $M_6O_{18}$  六員環中に取り込まれることによって得られる静電的利得とその取り込みによって起こる六員環の変形に必要なエネルギーとの大小関係がヘテロ原子の電荷に依存して変化するため、このような終状態の構造変化が起こると考えられる [引用文献]。

更に要素反応 のアンダーソン型 POM の形成反応の場合 ( $X= P^{5+}$ )、始状態は 6 個のジヒドロキシド型の単量体 OM に囲まれた 6 個のヒドロキシド酸素によって配位された  $P^{5+}$  からなる (図 3a)。そして誘電率が大きくなるにつれて、その 6 個の単量体 OM は  $P^{5+}$  から離れた位置で広がる傾向が見られる。

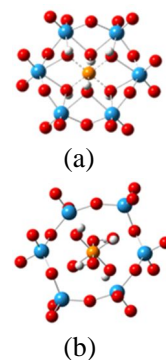


図1. アンダーソン型 POM の構造

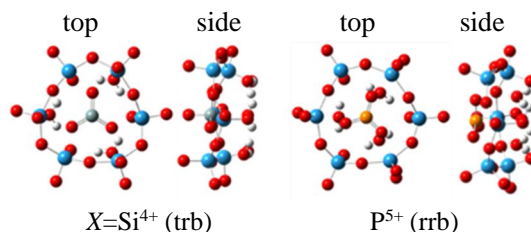


図2. ケギン型六員環の形状変化

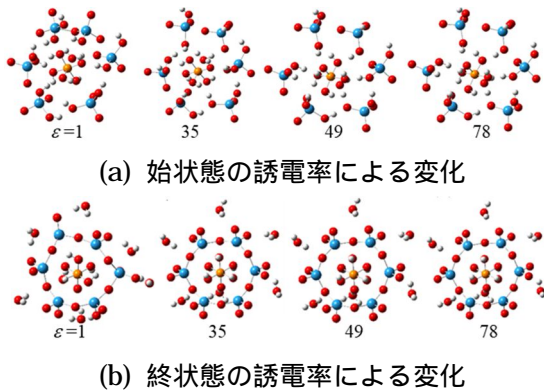


図3. 要素反応 の始状態と終状態の構造

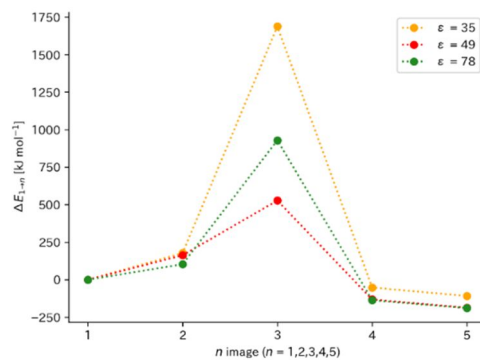


図4. 要素反応 の反応障壁の変化

要素反応 の終状態は、Anderson 型 POM の回りに 6 つの水分子が配位された構造とみなすことができた (図 3b)。この状態にある Anderson 型の六員環は真空では、著しく歪むが、誘電率 35 以上では、歪みは解消し、六員環構造にほとんど違いが認められなくなる。電子密度解析や結合軌道解析によると真空での六員環の歪は、六員環中の W と中心ユニット X(OH)<sub>6</sub> の酸素との間の結合的な相互作用のために起こることもわかった。

誘電率を変えて要素反応 の MEP を探索したところ、終状態が歪んだ構造となる真空の場合、NEB を 1000 サイクル以上まわしても解は得られなかった。しかし、それ以外の誘電率 (35) では、MEP を求めることができ、いずれの場合でも最小エネルギー経路の中央で、エネルギーが最も大きくなった (図 4)。このエネルギーが最大となった状態は、六員環構造を形成する直前の構造に相当し、中心ユニット X(OH)<sub>6</sub> のヒドロキッド基や単量体 OM が中心付近に密に集まった構造となる。このような混み合った構造の形成が、大きな反応障壁の原因となっていると考えられる。しかし、大きな誘電率を用いると反応障壁を小さくできることもわかった。

要素反応 に関しては、1 段で進む反応より逐次 3 段で進む反応の方が、より低い反応障壁を持つことがわかり、その反応はより大きな誘電率 (78) で有利に進む可能性があることも示された。(図 5 にこの反応の MEP 沿った系の構造変化を示す)。

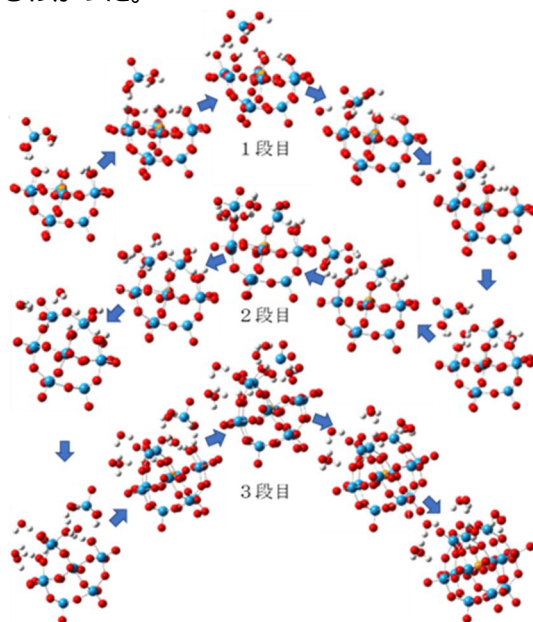


図5. 要素反応 のMEP (誘電率78)

(2) 計算機実験 2 : 後述の実実験 2 で示されるように多電子移動を示すと予想される新規のケギン型 POM [Cd<sub>4</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>6-</sup> の合成を行うと副生成物として [H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>6-</sup> が生成する可能性があることも分かった。ケギン型 POM の外表面の構造とイオンサイズはその内部に何を取り込んでいるのかには依存しない。このため、イオン全体の電荷が同じである限り、沈殿剤の種類を変えても、[Cd<sub>4</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>6-</sup> と [H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>6-</sup> を分離することはできない。[H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>6-</sup> の電荷を変える方法として [H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>6-</sup> の内部にあるプロトン付加サイトにプロトンを付加させることを考えた。この方法の実現の可能性を調べるため、[H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>6-</sup> の外表面に付加させたプロトンの内部サイトへ移動反応を第一原理計算により調べた。これにより H<sub>1</sub>[H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>5-</sup> から [H<sub>3</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>5-</sup> と H<sub>1</sub>[H<sub>3</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>4-</sup> から [H<sub>4</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>4-</sup> への両方のプロトン移動反応について固有反応座標 (IRC) を求めるとともに熱化学解析を行うことに成功した (図 6 に後者の反応の IRC を示す)。前者の反応の ΔG<sup>‡</sup> は 63.58 kJ mol<sup>-1</sup> で、後者の反応のそれは 64.48 kJ mol<sup>-1</sup> であり、両反応とも室温で十分起こり得ると言える。さらに水が共存する場合についても熱化学解析を行ったところ、後者の反応はこの場合、自発的に進まないことも分かった [引用文献]。

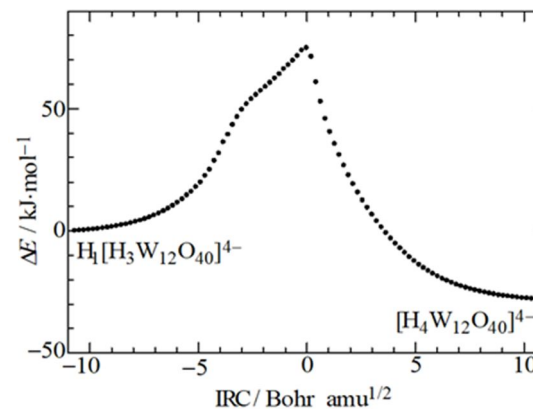


図6. プロトン移動反応のIRC ([H<sub>4</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>4-</sup>)

(3) 実実験 1 : 前述した実験により水熱条件下でのケギン型POMの存在領域を調べたところ、POM骨格の中心にヘテロ原子を持たない  $[H_2W_{12}O_{40}]^{6-}$  の場合、160 以上の温度では、ケギン型POM構造は壊れることがわかった。しかし、溶液のpHによって異なるが、ヘテロ原子源を共存させて処理すると200 の温度でもケギン型POM構造を保持できることが分かった（図7にヘテロ原子  $X=P^{5+}$  の共存下でのケギン型POMの存在領域の例を示す。紺色の領域がその存在領域である）。このことから、ヘテロ原子源の共存下での処理により、ケギン型POM骨格へのヘテロ原子の取り込みが起こると考えられる。なお、多電子移動を示すと予想される新規のケギン型POM合成のためにケギン型POM骨格へ取り込ませたい2価のカチオンについては、通常の方法でケギン型POM骨格へ取り込ませることができない  $Zn^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ,  $Co^{2+}$  を共存させても、今回調べた条件領域ではケギン型POMの存在は認められなかった。

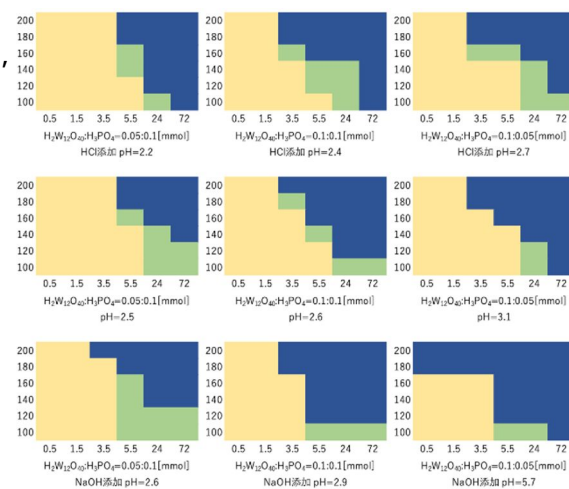


図7.  $X=P^{5+}$  共存下でのケギン型POMの存在領域

(4) 実実験 2 :  $Na_2WO_4 \cdot 2H_2O$  と  $Cd(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$  の水熱処理によりボトムアップ型の  $[Cd_1W_{12}O_{40}]^{6-}$  の水熱合成を試みたところ、120 °C, 120 h の処理で、ケギン型POM構造を持つ試料を合成することができた。得られた単結晶はディスオーダーをもつため、完全な構造解を得ることはできていないが、ケギン型POM構造を持つことは明らかである。しかし、ケギン型POM構造の中心での電子密度が低く、結晶中には  $[H_2W_{12}O_{40}]^{6-}$  がかなりの割合で混ざっていることが推測された。

#### <引用文献>

- K. Eda, T. Osakai, *Inorg. Chem.*, **54**, 2793–2801 (2015).
- K. Nakajima, K. Eda, S. Himeno, *Inorg. Chem.*, **49**, 5212–5215 (2010).
- A. Takazaki, K. Eda, T. Osakai, T. Nakajima, *J. Phys. Chem. A*, **121**, 7684–7689 (2017).
- S. Himeno, S. Murata and K. Eda, *Dalton Trans.*, **2009**, 6114–6119 (2009).
- T. Yamakawa, K. Eda, T. Osakai, T. Nakajima, *Journal of Computer Chemistry, Japan*, **18**, 257-258 (2019).
- K. Eda, M. Akune, C. Yasuma, H. Hotta, T. Osakai, T. Nakajima, *Inorganic Chemistry*, **60**, 15336–15342 (2021).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Teruyoshi Yamakawa, Kazuo Eda, Toshiyuki Osakai, Takahito Nakajima	4. 巻 18
2. 論文標題 Conversion Reaction of Polyoxometalates from Anderson	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem. Jpn.	6. 最初と最後の頁 257-258
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2477/jccj.2019-0039	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 Eda Kazuo, Akune Masahiko, Yasuma Chie, Hotta Hiroki, Osakai Toshiyuki, Nakajima Takahito	4. 巻 60
2. 論文標題 DFT Study of -Keggin-type Iso-polyoxotungstate Anions [HnW12O40](8-n)- (n=1-4): Can [H4W12O40]4- Exist?	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 15336 ~ 15342
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.inorgchem.1c01962	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8件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 阿久根 昌彦, 枝 和男, 大堺 利行, 中嶋 隆人
2. 発表標題 ケギン型ポリオキソメタレート ([XW12O40]n-) の形成反応経路に及ぼす溶媒の誘電率およびヘテロ原子の影響
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 枝 和男, 高崎亜希, 大堺利行, 中嶋隆人
2. 発表標題 ケギン型ポリタングステン酸イオンにおける多電子移動発現機構の研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山川皓由, 枝和男, 大塚利行, 中嶋隆人
2. 発表標題 Anderson型POMからKeggin型POMへの転換反応の研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高崎亜希, 枝 和男, 大塚利行, 中嶋隆人
2. 発表標題 ケギン型ポリタングステン酸イオンにおける多段階電子移動の量子化学的研究
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 高崎亜希, 枝 和男, 大塚利行, 中嶋隆人
2. 発表標題 ケギン型ポリタングステン酸イオンの電気化学的研究 5 : 仮想原子を用いた量子化学計算による検討
3. 学会等名 第64回ポラログラフィーおよび電気分析化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山川皓由, 高崎亜希, 枝和男, 大塚利行, 中嶋隆人
2. 発表標題 ケギン型ポリオキソメタレートイオンの骨格形成反応の研究
3. 学会等名 第64回ポラログラフィーおよび電気分析化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石上 快, 大塚利行, 中嶋隆人, 枝 和男
2. 発表標題 Keggin型ポリオキソメタレートの合成経路に関する研究
3. 学会等名 第67回ポーラログラフイーおよび電気分析化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 阿久根 昌彦, 枝 和男, 大塚 利行, 中嶋隆人
2. 発表標題 ケギン型ポリオキソタングステート([XW12O40]n - 8)の形成反応の研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会
4. 発表年 2021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	中嶋 隆人  (Nakajima Takahito)  (10312993)	国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・ チームリーダー  (82401)	

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