

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 12 日現在

機関番号：24302

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2019～2023

課題番号：19K22171

研究課題名(和文)核シッフモーメントの電子遮蔽効果：相対論的量子化学計算による高精度予測

研究課題名(英文)Electron shielding effects of nuclear Schiff moments: relativistic quantum-chemical calculations

研究代表者

波田 雅彦 (HADA, Masahiko)

京都府立大学・生命環境科学研究科・特任教授

研究者番号：20228480

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,800,000円

研究成果の概要(和文)：原子核が永久電気双極子モーメント(核シッフモーメント)を持つ事を仮定し、それが周辺電子によって遮蔽を受けた実効核シッフモーメントを相対論的量子化学理論によって精密に計算し、核シッフモーメントの探索実験を支援する。有効内部電場 $E(\text{eff})$ や分子の永久双極子モーメント(PDM)、超微細結合定数(HFCC)など分子物性をCCSD(T)レベルで計算できる計算コードを開発した。更に、QED補正をポテンシャルを考慮する計算コードを、原子だけでなく分子にも適用できるように新規コードを付加した。YbF分子など重原子を含む分子の有効内部電場 $E(\text{eff})$ の計算を実施し、従来よりも高精度な結果を提示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

核シッフモーメントの存在は、電子の永久電気双極子モーメント(電子EDM)の存在と同様に、小林・益川の標準模型が予測する値よりも大きなCP対称性破壊となる事の証明となるが、その存在は未だ確認されていない。従って、この研究がその存在証明の一助になれば意義深い。核シッフモーメントについては、Yale大学のDeMilleグループなど幾つかのグループで探索実験が精力的に検討されており、核磁気共鳴(NMR)理論を用いた実験も存在するので、それらの実験的研究を支援するための計算も実施する。

研究成果の概要(英文)：Assuming the permanent electric dipole moment of a nucleus (nuclear Schiff moment), the effective nuclear Schiff moment, which is shielded by the surrounding electrons, is calculated using the relativistic theory to support nuclear Schiff moment search experiments. A computer software has been developed to calculate molecular properties such as the effective internal electric field  $E(\text{eff})$  and the permanent dipole moment (PDM) and hyperfine coupling constant (HFCC) of molecules at the relativistic CCSD and CCSD(T) levels. A computer program to account for QED corrections in the potential has been also developed to apply not only to atoms but also to molecules.

Using the development of these methods, calculations of the effective internal electric field  $E(\text{eff})$  of YbF and some molecules containing heavy elements were carried out, presenting more accurate results than previous ones.

研究分野：量子化学

キーワード：シッフモーメント 相対論CCSD 核磁気遮蔽定数

### 1. 研究開始当初の背景

原子核が持つ永久電気双極子モーメント(核シッフモーメント)を仮定し、それが周辺電子によって遮蔽を受けた実効核シッフモーメントを相対論的量子化学理論によって計算し、核シッフモーメントの探索実験を支援する。核シッフモーメントの存在は、電子の永久電気双極子モーメント(電子 EDM)のそれと同様に、小林・益川の標準モデルが予測する値よりも大きな CP 対称性破壊の証明となるが、その存在は未だ確認されていない。核シッフモーメントについては、Yale 大学の DeMille グループなど幾つかのグループで探索実験が精力的に検討されており、核磁気共鳴(NMR)理論を用いた実験も存在するので、それらの実験的研究を支援するための計算を実施することは有意義である。2 原子分子を用いて電子や原子核の電気双極子モーメント(EDM)の観測がなされており、これらの電子 EDM は CP 対称性破れの証拠となるため注目されている。また、CP 対称性破れは、現在の宇宙の物質優勢の起源を説明するために重要であり、2 原子分子を用いた基本粒子の電気双極子モーメント(EDM)の観測は、CP 対称性破れの証拠となるため注目されているが、分子中の基本粒子の EDM を求めるには、高感度な実験に加えて、相対論的電子状態理論に基づく理論値の計算が必要である。

### 2. 研究の目的

核シッフモーメントの探索実験を支援するため、核シッフモーメントの精密計算に資する方法論の開発を実施する。また、計算精度を保証するために、実験値の存在する重原子核の核外電子により磁場遮蔽効果について計算を実施する。また、従来より実施してきた電子の永久電気双極子モーメント(電子 EDM)を仮定した有効内部電場の計算についても引き続き実施する。

### 3. 研究の方法

計算方法は、相対論的 CCSD レベルで有効内部電場や分子の永久双極子モーメント(PDM)と超微細結合定数(HFCC)など分子物性を計算できる計算プログラムを開発して使用する。QED 補正をポテンシャルで考慮するため、原子だけでなく分子にも適用できるような計算プログラムを開発する。

### 4. 研究成果

(1) 相対論的 CCSD レベルでの YbF 分子の有効内部電場  $E_{\text{eff}}$  の計算結果を実施した。 $E_{\text{eff}}$  を正確に得るには、全電子相関計算が必要であった。また、分子の永久双極子モーメント(PDM)と超微細結合定数(HFCC)の理論結果を実験結果と比較して、計算された  $E_{\text{eff}}$  の誤差を推定し、計算と実験の間の最大誤差は 7~8%であることを示した。これは、CCSD レベルでの  $E_{\text{eff}}$  の計算の世界最初のレポートである。表 1 に具体的な数値を示す。

表 1 . TIF の有効内部電場  $E_{\text{eff}}$  と永久双極子モーメント(PDM)と超微細結合定数(HFCC)の計算値と実験値の比較

	$E_{\text{eff}}$ (GV/cm) 有効電場	$A_{\text{HF}}$ (MHz) 超微細構造定数	DM (D) 分子の電気双極子
QZ 79e-CCSD(293)	23.1	7913	3.60
Experiments	-	7424	3.91
Error from experiments		7%	8%

次に、分極が弱い水素化物において、分極が強いフッ化物よりも  $E_{\text{eff}}$  が大きくなる可能性を示した。この結果は、誘起双極子モーメントのために極性分子の  $E_{\text{eff}}$  が大きいという従来の考え方と矛盾する。その理由を説明するために、軌道相互作用理論に基づいた新しい概念を提唱した。核電荷  $Z$  の  $E_{\text{eff}}$  と  $W_s$  の傾向の反転について解析した。一般に、 $E_{\text{eff}}$  と  $W_s$  は、 $Z$  が大きくなるにつれて増加すると考えられているが、12 グループのフッ化物の  $E_{\text{eff}}$  と  $W_s$  の値は異なる傾向を示す。この傾向は、 $(n-1)d$  電子の弱い遮蔽効果によって引き起こされる。更に、eEDM と S-PS の相互作用を実験するために超低温 HgA ( $A = \text{Li, Na, および K}$ ) 分子を利用するの可能性について検討した。

HgA の  $E_{\text{eff}}$  と  $W_s$  は、超低温分子に関する以前の実験のデータを参照することにより、超低温 HgA を使用した実験により、eEDM の現在の最良の上限を 1 桁改善できることを示唆した。更に、本研究では、全電子計算に対して有効な QED ポテンシャルを実装し、分子に適用できる計算プログラムを開発した。QED を考慮した計算については、原子の計算例は報告されていたが、有効な QED ポテンシャル積分の解析式がなかったため、分子の計算が困難であった。我々の計算プログラムを使用して、二量体 ( $M_2$ :  $M = \text{Hg}, \text{Rn}, \text{Cn}, \text{Og}$ ) の分光定数の精度検証を実施した。

(2) 電子遮蔽効果について相対論的量子化学計算による高精度予測を実施した。現状では核磁気遮蔽について計算・解析を進めた。種々の高周期の遷移金属錯体における W-, Pt-, Hg-NMR 化学シフトの計算を実施し、様々な観点から計算精度と解析法を比較検討した。計算方法は、内殻電子をポテンシャルとした計算 (ECP)、非相対論的全電子計算 (ALL)、擬相対論的全電子計算 (ZORA)、相対論的全電子計算 (Dirac) の 4 通りを比較検討した。Pt と Hg 化合物の結果を図 1 に示す。DFT の汎関数は全て B3LYP とした。分子構造は全て ECP で決定した。計算精度に関しては、ZORA 法と Dirac 法は同程度の精度であり、両者とも実験値と良い相関を示した。ZORA 法では溶媒効果を考慮することができたので、その為 Dirac 法よりも更に実験値との一致は良好であった。相対論効果は Spin-orbit 相互作用の効果が大きいことが示された。ECP は NMR 化学シフトを全く再現せず、この種の計算に於いては ECP の使用に問題があることが示された。

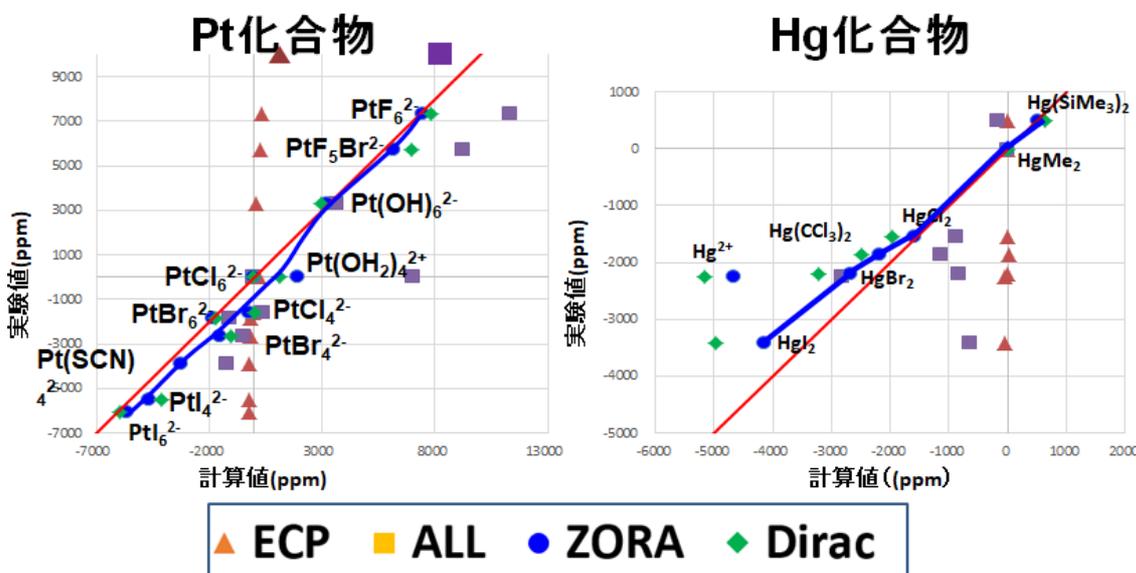


図 1 . 種々の計算レベルにおける Pt 化合物と Hg 化合物のそれぞれ Pt-, Hg-NMR 化学シフトと実験値との比較

次に、励起状態、及び、電子ポピュレーションと NMR 化学シフトの相関を検討した。W のような中期の遷移金属では、明確な磁気許容の d-d 遷移励起が存在するため、それらの d-d 遷移エネルギーと化学シフトとの相関は明瞭であった。一方では電子ポピュレーションとの相関は不明瞭であった。Hg, Pt-NMR では d-d 遷移のエネルギーが高過ぎて、d-d 遷移エネルギーと化学シフトには明瞭な関係が見いだせなかった。一方、電子ポピュレーションとの相関は明瞭であった。Pt では d-軌道の電子ポピュレーションと、Hg では p-軌道の電子ポピュレーションとの相関がみられた。共鳴核が周期表のどの位置に在るかによって NMR 化学シフトの挙動が異なり、適切な解析方法が異なることが示唆された。

(3) 反磁性分子において、観測可能な原子核 EDM の主要な要因の一つである核のシッフモーメント (NSM) に対する電子状態項  $F(r)$  ( $r$  は核中心からの距離) を表現する方法の開発を実施した。NSM は、CP 対称性を破る相互作用により、原子核内の電荷分布が球対称からずれることで生じる。従来の電子状態項では、核上の電子密度の微分値 ( $X$ ) という近似表現が用いられてきた。本研究では、Gauss 型基底を用いた電子状態項の厳密表現を用いて、適切な近似表現を検討した。対象とした分子は、重原子を含む

2 原子分子 TIF, HgF+, HgO, RaO であり、計算方法は Dirac-Coulomb-Fock である。電子状態計算の結果から、NSM の電子状態項を算出した。基底関数の依存性が大きいので、基底関数の選択についても検討を加えた。基底関数としては、核内部についても表現できるように、even-tempered の基底を用いた。計算された NSM の電子状態項を Fitting するために、厳密表現と多項式表現 ( マクローリン展開、核表面でのテイラー展開、原子核領域での最小二乗法フィッティング ) を比較するため、HOMO の電子状態項を原子核領域で比較した。その結果、マクローリン展開、テイラー展開による多項式表現ではそれぞれ核表面付近、核中央領域で厳密表現との誤差が大きくなることが分かった。一方、最小二乗法による多項式表現では原子核領域 ( $\sim 10^{-4}$  a.u.) において全体的に良く厳密表現を再現することができた。したがって、最小二乗法による多項式表現が厳密表現を記述するのに最も適しており、従来表現に比べて平均絶対誤差は約 1/20 に減少した。本方法は従来法に代わる有望な方法であると考えられる。

表 2 . プロトンの EDM とシッフモーメント

Method	Reference	$X$ (a.u.)	$d_p$ (e cm)	$Q$ (e fm <sup>3</sup> )
DF	<a href="#">Laerdahl et al.</a>	8747	$-1.5 \pm 2.5 \times 10^{-23}$	$5.6 \pm 9.5 \times 10^{-11}$
Quasi-rel. CCSD	<a href="#">Petrov et al.</a>	7635	$-1.7 \pm 2.8 \times 10^{-23}$	$6.4 \pm 11 \times 10^{-11}$
Quasi-rel. CCSD	<a href="#">Zuba et al.</a>	7450	$-1.7 \pm 2.9 \times 10^{-23}$ <sup>a</sup>	$6.6 \pm 11 \times 10^{-11}$
Dirac-CCSD(T)-FFPT	This work	6856	$-1.9 \pm 3.2 \times 10^{-23}$	$7.1 \pm 12 \times 10^{-11}$

次に、TIF 分子の核シッフモーメント(Q)と核子電気双極子モーメントの増強因子 X の現在の精度を超えることを目指した計算を実施した。相対論的 CCSD(T)法を用いて X = 6856 a.u. を得た(表 2)。この新しい X の値により、Q とプロトン EDM の上限が従来の値より約 10%改善された。

Reference (表 2)

- [1] J. K. Laerdahl, T. Saue, K. Fægri, Jr., and H. M. Quiney, Phys. Rev. Lett. **79**, 1642, (1997).
- [2] A. N. Petrov, N. S. Mosyagin, T. A. Isaev, A. V. Titov, V. F. Ezhov, E. Eliav, and U. Kaldor, Phys. Rev. Lett. **88**, 073001 (2002).
- [3] V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, and J. S. M. Ginges, M. G. Kozlov, Phys. Rev. A, **66**, 012111 (2002).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計39件（うち査読付論文 39件／うち国際共著 11件／うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 S. Roy, P. Shukla, R. Kumar, S. C. Sahoo, T. K. Pal, A. Rajpute, J. Klak, M. Hada, K. R. Vignesh, S. Das	4. 巻 36(12)
2. 論文標題 Utilization of diamagnetic Zn(II) ion to boost the anisotropic nature of Ln(III) ion in heterodinuclear Zn(II)-Ln(III) SMMs	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Organometallic Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/aoc.6914	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 K. Nomiya, N. Nakatani, N. Nakayama, H. Goto, M. Nakagaki, S. Sakaki, M. Yoshida, M. Kato, M. Hada	4. 巻 126(42)
2. 論文標題 Theoretical study on the vapochromic Ni(II)-quinonoid complex: One-dimensional stacking structure-based color switchin	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem.	6. 最初と最後の頁 7687-7694
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c06079	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 Zhifeng Ma, Naoki Nakatani and Masahiko Hada	4. 巻 42(26)
2. 論文標題 Insights into the Electronic Structure and Mechanism of Norcarane Hydroxylation by OxoMn(V) Porphyrin Complexes: A Density Functional Theory Study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Comp. Chem.	6. 最初と最後の頁 1920-1928
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26715	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 Akira Yoshida, Minoru Abe, and Masahiko Hada	4. 巻 125(29)
2. 論文標題 Density Functional Study on Compounds to Accelerate Electron Capture Decay of <sup>7</sup> Be	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys. A.	6. 最初と最後の頁 6356-6361
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c01491	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 Yuna Suzuki, Masahiko Hada, and Hiroshi Fujii	4. 巻 223
2. 論文標題 Synthesis, Characterization, and Reactivity of Oxoiron(IV) Porphyrin -Cation Radical Complexes bearing Cationic 2-N-Methylpyridinium Group	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Inorganic Biochemistry	6. 最初と最後の頁 111542(10pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jinorgbio.2021.111542	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 Masaya Miyamoto and Masahiko Hada	4. 巻 94(6)
2. 論文標題 IR Intensities of CO Molecules Adsorbed on Atop and Low-coordinate Sites of Pd Nanoparticles: Analysis Using Natural Perturbation Orbitals.	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Bull. Chem. Soc. Japan	6. 最初と最後の頁 1789-1793
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20210073	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 Mami Fukui, Kanako Ueno, Masahiko Hada, Hiroshi Fujii	4. 巻 60(5)
2. 論文標題 Meso-Substitution Activates Oxoiron(IV) Porphyrin -Cation Radical Complex More Than Pyrrole-Substitution for Atom Transfer Reaction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Inorg. Chem.	6. 最初と最後の頁 3207-3217
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c03548	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 Masaya Miyamoto and Masahiko Hada	4. 巻 119(6)
2. 論文標題 13C NMR chemical shifts in substituted benzenes: analysis using natural perturbation orbitals and substitution effects	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Mol. Phys.	6. 最初と最後の頁 e1843722
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00268976.2020.1843722	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 Yi, Jun; Nakatani, Naoki; Tomotsu, Norio; Nomura, Kotohiro; Hada, Masahiko	4. 巻 40(6)
2. 論文標題 Theoretical study of reaction mechanism for half-titanocene-catalyzed styrene polymerization, ethylene polymerization, and styrene-ethylene copolymerization: Roles of the neutral Ti(III) and the cationic Ti(IV) species	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 643-653
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.0c00715	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 Yi Jun, Nakatani Naoki, Nomura Kotohiro, Hada Masahiko	4. 巻 22
2. 論文標題 Time-dependent DFT study of the K-edge spectra of vanadium and titanium complexes: effects of chloride ligands on pre-edge features	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 674 ~ 682
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP05891E	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 Ma Zhifeng, Nakatani Naoki, Fujii Hiroshi, Hada Masahiko	4. 巻 93
2. 論文標題 Effect of External Electric Fields on the Oxidation Reaction of Olefins by Fe(IV)OCl-Porphyrin Complexes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 187 ~ 193
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190293	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 Suzuki Hajime, Kanno Shohei, Hada Masahiko, Abe Ryu, Saeki Akinori	4. 巻 32
2. 論文標題 Exploring the Relationship between Effective Mass, Transient Photoconductivity, and Photocatalytic Activity of $Sr_xPb_{1-x}BiO_2Cl$ ( $x = 0-1$ ) Oxyhalides	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 4166 ~ 4173
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.9b05366	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 Feng Shixiang, Yi Jun, Miura Hiroki, Nakatani Naoki, Hada Masahiko, Shishido Tetsuya	4. 巻 10
2. 論文標題 Experimental and Theoretical Investigation of the Role of Bismuth in Promoting the Selective Oxidation of Glycerol over Supported Pt-Bi Catalyst under Mild Conditions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 6071 ~ 6083
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.0c00974	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 Abe Minori, Tsutsui Takashi, Ekman J?rgen, Hada Masahiko, Das Bhanu	4. 巻 118
2. 論文標題 Accurate determination of the enhancement factor X for the nuclear Schiff moment in 205TlF molecule based on the four-component relativistic coupled-cluster theory	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Molecular Physics	6. 最初と最後の頁 e1767814
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00268976.2020.1767814	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 Salmahaminati, Abe Minori, Purnama Indra, Mulyana Jacob Yan, Hada Masahiko	4. 巻 6
2. 論文標題 Density Functional Study of Metal-to-Ligand Charge Transfer and Hole-Hopping in Ruthenium(II) Complexes with Alkyl-Substituted Bipyridine Ligands	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 55 ~ 64
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c01199	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 Saito Masaichi, Hamada Jumpei, Furukawa Shunsuke, Hada Masahiko, Dostal Libor, Ruzicka Ales	4. 巻 39
2. 論文標題 Transition-Metal Capping to Suppress Back-Donation to Enhance Donor Ability	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 4191 ~ 4194
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.0c00534	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 Miyamoto Masaya, Hada Masahiko	4. 巻 41
2. 論文標題 Surface enhanced Raman scattering of M2 -pyrazine-M2 (M = Cu, Ag, Au): Analysis by natural perturbation orbitals and density functional theory functional dependence.	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1628 ~ 1637
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26205	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 Yi Jun, Nakatani Naoki, Tomotsu Norio, Nomura Kotohiro, Hada Masahiko	4. 巻 40
2. 論文標題 Theoretical Studies of Reaction Mechanisms for Half-Titanocene-Catalyzed Styrene Polymerization, Ethylene Polymerization, and Styrene-Ethylene Copolymerization: Roles of the Neutral Ti(III) and the Cationic Ti(IV) Species	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 643 ~ 653
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.0c00715	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 Miyamoto Masaya, Hada Masahiko	4. 巻 119
2. 論文標題 13C NMR chemical shifts in substituted benzenes: analysis using natural perturbation orbitals and substitution effects	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Molecular Physics	6. 最初と最後の頁 e1843722
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00268976.2020.1843722	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 菅野翔平、今村穰、波田雅彦	4. 巻 50
2. 論文標題 マテリアルズ・インフォマティクスを用いたペロブスカイト太陽電池材料の探索	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 分離技術	6. 最初と最後の頁 18-24
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 Fukui Nami, Ueno Kanako, Hada Masahiko, Fujii Hiroshi	4. 巻 60
2. 論文標題 Meso-Substitution Activates Oxoiron(IV) Porphyrin -Cation Radical Complex More Than Pyrrole-Substitution for Atom Transfer Reaction.	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 3207 ~ 3217
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c03548	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 Miyamoto Masaya, Hada Masahiko	4. 巻 1
2. 論文標題 IR Intensities of CO Molecules Adsorbed on Atop and Low-coordinate Sites of Pd Nanoparticles: Analysis Using Natural Perturbation Orbitals.	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Bull. Chem. Soc. Japan	6. 最初と最後の頁 1
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 Masatoshi, Bala Renu, Abe Minori	4. 巻 53
2. 論文標題 Attainable accuracies of QH+ rotational transition frequencies (Q: 40Ca, 24Mg, 202Hg)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 085401 ~ 085401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6455/ab7425	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 Prasanna V. Srinivasa, Sahoo Bijaya K., Abe Minori, Das Bhanu P.	4. 巻 12
2. 論文標題 Significance of Non-Linear Terms in the Relativistic Coupled-Cluster Theory in the Determination of Molecular Properties	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Symmetry	6. 最初と最後の頁 811 ~ 811
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/sym12050811	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 A. Velloth, Y. Imamura, M. Hada	4. 巻 58
2. 論文標題 Functionalization of Endohedral Metallofullerenes toward Improving Barrier Height for the Relaxation of Magnetization for Dy <sub>2</sub> @C <sub>80</sub> -X (X = CF <sub>3</sub> , C <sub>3</sub> N <sub>3</sub> Ph <sub>2</sub> )	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 1208-1215
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b02652	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 A. Sunaga, V. S. Prasanna, M. Abe, M. Hada, and B. P. Das	4. 巻 99
2. 論文標題 Ultracold mercury-alkali-metal molecules for electron-electric-dipole-moment searches	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Rev. A	6. 最初と最後の頁 040501(6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.99.040501	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 Shohei Kanno, Yutaka Imamura, and Masahiko Hada	4. 巻 3
2. 論文標題 Alternative materials for perovskite solar cells from materials informatics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Materials	6. 最初と最後の頁 075403(1-8)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.075403	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 Zhifeng Ma, Kasumi Ukaji, Naoki Nakatani, Hiroshi Fujii, and Masahiko Hada	4. 巻 40(19)
2. 論文標題 Substitution Effects on Olefin Epoxidation Catalyzed by Oxoiron(IV) Porphyrin p-Cation Radical Complexes: A DFT study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Comp. Chem.	6. 最初と最後の頁 1780-1788
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25831	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 Indra Purnama, Salmahaminati, Minoru Abe, Masahiko Hada, Yuji Kubo, and Jacob Yan Mulyana	4. 巻 48
2. 論文標題 Factors influencing the photoelectrochemical device performance sensitized by ruthenium polypyridyl dyes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dalton Trans.	6. 最初と最後の頁 688-695
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8DT03502D	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 V. S. Prasanna, A. Sunaga, M. Abe, M. Hada, N. Shitara, A. Sakurai, B. P. Das	4. 巻 7
2. 論文標題 The Role of Relativistic Many-Body Theory in Electron Electric Dipole Moment Searches Using Cold Molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Atoms	6. 最初と最後の頁 58(20)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/atoms70200	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 A. Sunaga, M. Abe, M. Hada and B. P. Das	4. 巻 99(6)
2. 論文標題 Merits of heavy-heavy diatomic molecules for electron electric dipole-moment searches	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Rev. A	6. 最初と最後の頁 062506(7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.99.062506	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 Minoru Abe, Masahiko Hada, Ken Tanaka, and Yoshihiko Yamamoto	4. 巻 38
2. 論文標題 Inverted Sandwich Rh Complex Bearing a Plumbale Ligand and its Catalytic Activity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 3099-3103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00339	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 Yutaka Imamura, Marina Suganuma, and Masahiko Hada	4. 巻 123(29)
2. 論文標題 Computational Study on Search for Non-Fullerene Acceptors, Examination on Interface Geometry and Investigation on Electron Transfer	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem.	6. 最初と最後の頁 17678-17685
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b02933	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 Yuri Ishimizu, Zhifeng Ma, Masahiko Hada, Hiroshi Fujii	4. 巻 24
2. 論文標題 Experimental and theoretical studies of the porphyrin ligand effect on the electronic structure and reactivity of oxoiron(IV) porphyrin $\pi$ -cation-radical complexes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Biological and Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 483-494
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00775-019-01664-3	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 Atsuki Ikeda, Shahed Ranaa, Soichi Sato, Kazunori Hirabayashi, Masahiko Hada, Toshio Shimizu, and Ken-ichi Sugiura	4. 巻 75
2. 論文標題 Molecular structure and basic spectroscopic properties of 3-selenocyanatoindole: An important reference compound in organoselenium research	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Tetrahedron	6. 最初と最後の頁 130551(1-7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tet.2019.130551	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 Radhika Narayanan, Marisa Nakada, Minori Abe, Masaichi Saito, Masahiko Hada	4. 巻 58(21)
2. 論文標題 $^{13}\text{C}$ - and $^{207}\text{Pb}$ -NMR Chemical Shifts of Dirhodium- and Dilithioplumbole Complexes: A Quantum Chemical Assessment	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 14708-14719
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b02367	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 Yi, Jun; Nakatani, Naoki; Nomura, Kotohiro; Hada, Masahiko	4. 巻 22
2. 論文標題 Time-dependent DFT study of K-edge spectra for vanadium and titanium complexes: Effects of chloride ligands on pre-edge feature	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 674-683
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP05891E	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 Z. Ma, H. Fujii, N. Nakatani, M. Hada	4. 巻 93(2)
2. 論文標題 Effect of External Electric Fields on the Oxidation Reaction of Olefins by Fe(IV)OCl-Porphyrin Complexes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bulletin of Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 187-192
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190293	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 Ayaki Sunaga, Minori Abe, Srinivasa Prasanna, Takatoshi Aoki, Masahiko Hada	4. 巻 53(1)
2. 論文標題 Relativistic Coupled-Cluster Study of Diatomic Metal--Alkali-metal Molecules for Electron Electric Dipole Moment Searches	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 015102(20)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6455/ab5255	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

〔学会発表〕 計10件(うち招待講演 6件/うち国際学会 6件)

1. 発表者名 波田 雅彦
2. 発表標題 NMRの精密計算と電子EDM探査を目指した相対論的量子化学計算
3. 学会等名 IQCE量子化学探索講演会2020(特定非営利活動法人量子化学探索研究所)(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阿部 穰里
2. 発表標題 微生物によるウラン還元同位体効果の理論的考察
3. 学会等名 2020年度日本地球化学会年会（日本地球化学会）（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阿部 穰里
2. 発表標題 化学反応経路中のウラン同位体効果に関する理論的研究
3. 学会等名 第18階同位体科学研究会（同位体科学会）（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Minori Abe
2. 発表標題 Diatomic molecular electronic wavefunction inside a nucleus for measurement of nuclear Schiff moment
3. 学会等名 Yamada Conference LXXII: The 8th Asia-Pacific conference on Few-Body problems in Physics(APFB2020)（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Minori Abe
2. 発表標題 Reconsideration of the electronic term of the Schiff moment in closed-shell molecules
3. 学会等名 Fundamental Sciences &Quantum Technologies using Atomic Systems 2020（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Jun Yi and Masahiko Hada
2. 発表標題 51V-NMR Chemical Shifts and Analyses of Vanadium Complex Catalysts: A Cooperation of QC calculation and MLR Analysis
3. 学会等名 5th Edition on Global Conference on Catalysis, Chemical Engineering&Technology (CAT 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ataru Sato, Minori Abe and Masahiko Hada
2. 発表標題 Theoretical study of uranium isotope fractionation by bacteria
3. 学会等名 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 Shohei Kanno, Yutaka Imamura, and Masahiko Hada
2. 発表標題 A suggestion of Novel Materials for Perovskite Solar Cells from Materials Informatics
3. 学会等名 Pure And Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ataru Sato, Minori Abe, and Masahiko Hada
2. 発表標題 Relativistic Quantum-Chemical Calculation on Uranium Isotope Fractionation in Biotic Reduction
3. 学会等名 Pure And Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 06.Ataru Sato, Minori Abe, and Masahiko Hada
2. 発表標題 Mechanistic Elucidation of Uranium Isotope Fractionation in Biotic Reduction using Ab-initio Calculations
3. 学会等名 American Geophysical Union Fall meeting 2019
4. 発表年 2019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	阿部 穰里  (Abe Minori)  (60534485)	広島大学・先進理工学系研究科・准教授    (15401)	

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