

令和 5 年 5 月 24 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K05217

研究課題名(和文) 金属ナノ粒子の触媒活性見だ目判別に向けた遷移状態の情報化学的研究

研究課題名(英文) Theoretical study on catalytic activity of metal nanoparticles by transition states

研究代表者

高 敏 (GAO, MIN)

北海道大学・化学反応創成研究拠点・准教授

研究者番号：40784202

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：不均一触媒の原子レベルでの構造は実験的には制御が容易ではないため、計算においては多様な分子構造の考慮が必要不可欠である。また、触媒能を発現する活性サイトは実験的にも理論的にも予測が難しく、触媒機構の解析研究では、高い対称性を課す計算や最安定構造を用いた限定的な計算が行われる。本研究では、触媒構造とその活性サイトに関する系統的な構造計算に基づき不均一触媒の活性能の理論解析を行い、多様な構造が触媒活性に与える影響を理解することで、触媒における構造-触媒活性相関に関する研究に取り組んだ。また、複数の実験グループとの共同研究を通じ、系統的な構造計算に基づく触媒反応機構解析の重要性を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

金属ナノ粒子触媒は各種の化学工業において極めて重要な役割を担っている。燃料電池用触媒、排気ガス触媒、光触媒による水素生産など、その活用が期待される分野は多岐にわたる。近年、量子化学計算を用いた触媒の量子化学計算が可能になってきており、実験で観察できない分子の構造や反応中間体、反応生成物のエネルギー、反応速度など、化学反応に関する重要な情報を提供することができる。本研究における、多様な構造が触媒活性に与える影響の理解とそれに基づく触媒能の解析を通じて得られた「構造-触媒活性相関に関する知見」は、将来的に、原子レベルでの機構理解に立脚した新規触媒開発において役立つことが期待される。

研究成果の概要(英文)：Since the atomic-level structure of heterogeneous catalysts is not easily controlled experimentally, it is essential to consider a wide variety of molecular structures in calculations. In addition, the active site that expresses catalytic activity is difficult to predict both experimentally and theoretically, and analytical studies of catalytic mechanisms involve calculations that impose high symmetry or are limited to the most stable structures. In this study, theoretical analysis of the activity of heterogeneous catalysts based on systematic structural calculations of catalyst structures and their active sites was performed to understand the influence of various structures on catalytic activity, and to study structure-catalytic activity relationships in catalysis. Through collaboration with several experimental groups, the importance of catalytic reaction mechanism analysis based on systematic structural calculations was demonstrated.

研究分野：物理化学

キーワード：理論計算 金属ナノ粒子 網羅探索

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

金属ナノ粒子触媒は各種の化学工業において極めて重要な役割を担っている。燃料電池用触媒、排気ガス触媒、光触媒による水素生産など、その活用が期待される分野は多岐にわたる。近年、量子化学計算を用いた触媒の量子化学計算が可能になってきており、実験で観察できない分子の構造や反応中間体、反応生成物のエネルギー、反応速度など、化学反応に関する重要な情報を提供することができる。さらに、反応条件の最適化や、化合物設計を加速へとつなげるため、素材工学や医薬品開発など、様々な分野での応用が期待されている。金属ナノ粒子の触媒活性はその構造、サイズ、電荷など様々な因子に依存するため、触媒活性の主要な影響因子を解明するのは容易ではない。

不均一触媒の原子レベルでの構造は実験的には制御が容易ではないため、計算においては多様な分子構造の考慮が必要不可欠である。また、触媒能を発現する活性サイトは実験的にも理論的にも予測が難しく、触媒機構の解析研究では、高い対称性を課す計算や最安定構造を用いた限定的な計算が行われる。これに対して我々は、触媒構造とその活性サイトに関する系統的な構造計算に基づき不均一系触媒の活性能の理論解析を行い、多様な構造が触媒活性に与える影響の理解とそれに基づく触媒能の解析を行い、触媒における構造-触媒活性相関に関する概念の開拓に取り組んできた。

これまでの研究において、最も安定なクラスター構造や吸着サイトが必ずしも反応性が高いとは限らず、反応機構を適切に記述するためには、多様な異性体構造や活性点を系統的に考慮することが重要であることを示した。特に、数個から十数個の原子から成る金属クラスターは柔らかく、多様な構造を有するため、触媒活性を理論的に解析するには、実在系に近い理論計算モデルを用いて、大量の計算を網羅的に実行する必要がある。しかし、構造最適化のコストが膨大なために理論計算モデルは小さくならざるを得ず、実験系との間には大きなギャップが存在することが課題であった。

### 2. 研究の目的

本研究は、小規模金属ナノ粒子の触媒活性の本質を、量子化学計算を用いて明らかにし、実在する金属ナノ粒子の触媒活性予測を目指す。さらに、実際の応用計算を通じて金属クラスターの多様な分子構造を蓄積し、その構造に基づき、反応性と金属クラスター構造の関係性を明らかにする。実験研究グループと連携することで、本研究で研究する方法論を表面担持金属ナノ粒子の触媒機構の解明へと展開し、その反応機構を理解する。透過型電子顕微鏡の発展により、将来的には、観測された構造に対して本手法を適用することで触媒活性の解析が可能になると期待される。

### 3. 研究の方法

金属クラスターの活性サイトを解析するプログラムを作成し、多様な金属クラスターにおける小分子の分解反応への応用を進めた。電子状態計算に PAW 型擬ポテンシャルを用いた平面波第一原理計算プログラム VASP を利用した。汎関数には分散力を経験的に補正した PBE-D3 を用い、カットオフエネルギーは 400eV とした。結合の解析には、Dinnington と Schmidt により周期系に拡張された自然結合軌道 (NBO) 法を利用した。分子構造の探索、遷移状態の最適化は GRRM17 を使用した。

### 4. 研究成果

本研究では、金属クラスターの多様な構造を考慮し、活性サイトを系統的に調べ、機械学習を併用することで、活性サイトを明らかにすることを目指し、研究を進めた。また、金属クラスターの多様な分子構造について、得られた計算データの収集を進めた。さらに、複数の金属種における、小分子の分解反応の反応経路データを計算・収集した。金属クラスターの活性サイトを特定するプログラムを作成し、金クラスターにおける小分子の分解反応に応用した。また、得られた多くの金属クラスター構造に基づき、反応性と金属クラスター構造の関係性について解析を進めた。金属クラスターの構造に加えて、表面担持した金属クラスターの触媒活性の構造依存性へと研究を展開した。以下には、得られた研究成果についてまとめる。

「h-BN/Au(111)表面に担持された金クラスターにおける水素発生反応の触媒活性」

“Catalytic Activity of Gold Clusters Supported on h-BN/Au(111) Surface for Hydrogen Evolution Reaction” (J. Phys. Chem. C 125, 2, 1334-1344 (2021))

表面に担持された金属クラスターは、金属クラスターそのものの構造変化に加えて、表面との相互作用により多数の構造が存在する。従来の理論計算での研究は、想定される金属クラスター構造の中で、最も安定な構造のみを活性種と考えて計算するものがほとんどであった。しかし、実際には、最も安定な金属クラスター構造のみが反応に寄与するわけではなく、多数の金属クラスター構造や複数の活性サイトを考慮した理論計算が求められていた。そこで、本研究では、h-BN に担持した多数の金属クラスターの構造変化を考慮し、多数の活性点を調べることで、水素

発生反応に対して金属クラスター構造が与える影響を明らかにした。また、この研究を通じて、表面に担持した金属クラスターを用いる反応において、機構を適切に理解するためには、異性体構造、多様な活性点を系統的に考慮することが重要であることを示した。

「h-BN の触媒的機能化による分子状酸素による酸化・エポキシ化反応への応用」

“Catalytic Functionalization of Hexagonal Boron Nitride for Oxidation and Epoxidation Reactions by Molecular Oxygen” (J. Phys. Chem. C, 125, 19219-19228 (2021))

代表者は、触媒不活性な h-BN への欠陥導入による、未知の触媒材料の活性を実験に先立って予測する研究に取り組んだ。特に、h-BN 表面上のホウ素を炭素に置換し、表面の活性サイトを系統的調べた。炭素をドーブした六方晶窒化ホウ素 (h-BN) に吸着した分子状酸素による一酸化炭素の触媒酸化とエチレンのエポキシ化反応機構を理論的に解明した。エネルギープロファイルと活性化障壁のドーブ炭素原子間距離依存性を解析した。その結果、考えられる酸化反応とエポキシ化反応は、C ドーパントの近傍の B 原子サイトだけでなく、C ドーパントから比較的大きな距離でも起こりうることを示された。計算の結果、これらの反応経路に沿った反応中間体は、ドーブされた C 原子からの距離が長くなるにつれてわずかに不安定化するが、反応障壁は主にそのままであることが示された。したがって、h-BN への C ドーピングは、分子状酸素による酸化反応やエポキシ化反応のための不活性な h-BN 系材料の触媒的機能化のための非常に有望な方法である。

「実験グループとの共同研究」

これらの系統的探索に基づく知見を多数の実験グループとの共同研究によって実際の触媒反応の機構解析へと応用した。金属クラスターの構造に加えて、表面担持した金属クラスターの触媒活性の構造依存性へも研究を展開した。

金属酸化物は金属触媒の担体材料として使用されているが、高温条件においてはコーキング生成の問題が未だに存在する。これに対して、上海大学の Zhang Dengsong グループにより窒化ホウ素 (BN) 担持した Ni 触媒がコーキング耐性を示した。理論計算により多様な構造を計算した結果、従来の金属酸化物担持した Ni 触媒とは異なり、BN 担持 Ni 触媒は CH<sub>4</sub> の最初の C-H 解離を促進しながら、最後の C-H 結合の切断を抑制するため、メタンの完全分解を抑制し、コーキングの問題を抑制することを明らかにした。本研究は、BN 担持 Ni 触媒におけるコーキング耐性の根本的な理由が、C-H 結合の選択的活性化にあることを示した。また BN 表面が担持した Ni 粒子による CO<sub>2</sub> の解離を促進する事を示した。六方晶窒化ホウ素 (h-BN) は広いバンドギャップを持つ絶縁体であり、触媒活性については研究されていなかった。しかし、代表者は 2012 から理論計算によって欠陥や金属基板を導入することによって、h-BN は高い触媒活性を制御する事が可能であることを示した。

また、同グループは、欠陥がある h-BN に担持した NiCo 粒子を創成し、CH<sub>4</sub> のドライリフォーミングに応用し、コーク劣化抑制を実現した。また、本研究では、理論計算により、欠陥の種類は表面の電子構造に強い影響を及ぼすことを明らかにした。窒素欠陥は電子ドナー、ホウ素欠陥は電子アクセプターになっており、担持された金属種類 (NiCo) 粒子による CH<sub>4</sub> と CO<sub>2</sub> の反応活性に大きく影響することが明らかになった。

シンガポール国立大学 Yan Ning 教授と共同し、イオン液体が、単原子触媒の安定性や活性へ与える影響を明らかにした。東京工業大学横井准教授と共同し、酸化金属における CH<sub>4</sub> の活性化における触媒粒子のサイズの依存性を明らかにした。北海道大学福岡教授と共同し、ZrO<sub>2</sub> 表面にドーブしたコバルトが、CO<sub>2</sub> 吸着へ与える影響を明らかにした。

主な発表論文：

S. Yasuda, R. Osuga, Y. Kunitake, K. Kato, A. Fukuoka, H. Kobayashi, **M. Gao**, J. Hasegawa, R. Manabe, H. Shima, S. Tsutsuminai, T. Yokoi, Zeolite-supported ultra-small nickel as catalyst for selective oxidation of methane to syngas, *Commun. Chem.*, 3, 129, (2020) (査読有)

DOI: 10.1038/s42004-020-00375-0

S. Ding\*, M. Huelsey, H. An, Q. He, H. Asakura\*, **M. Gao**\*, J. Hasegawa, T. Tanaka, N. Yan\*  
Ionic Liquid-stabilized Single-atom Rh Catalyst against Leaching, *CCS Chem.* 3, 1814-1822. (2021) (査読有)

DOI: 10.31635/ccschem.021.202101063

N. Dostagir, R. Rattanawan, **M. Gao**, J. Hasegawa, K. Asakura, A. Fukuoka\*, A. Shrotri\*,  
Selective Hydrogenation of CO<sub>2</sub> over Interfacial Sites Co Single Atoms in ZrO<sub>2</sub> having inherent  
oxygen vacancies, *ACS Catal.* 11, 9450-9461. (2021) (査読有)

DOI: 10.1021/acscatal.1c02041

**M. Gao\***, B. Wang, T. Tsuneda, A. Lyalin, T. Taketsugu\*, Catalytic functionalization of hexagonal  
boron nitride for oxidation and epoxidation reactions by molecular oxygen *J. Phys. Chem. C*, 125,  
19219-19228 (2021) (査読有)

DOI : 10.1021/acs.jpcc.1c04661

**M. Gao\***, M. Nakahara, A. Lyalin, T. Taketsugu\*, Catalytic Activity of Gold Clusters Supported  
on h-BN/Au(111) Surface for Hydrogen Evolution Reaction, *J. Phys. Chem. C*, 125, 1334-1344,  
(2021) (査読有)

DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c08826

J. Deng†, **M. Gao**†, J. Hasegawa, X. Zhang, A. Wang, A. Chen, and D. Zhang\*

Unravelling the anomalous coking-resistance over boron nitride supported Ni catalysts for dry  
reforming of methane, *CCS Chem.* 0, 1-14. (2022) (査読有) (†は equally contributed 1<sup>st</sup> author)

DOI: 10.31635/ccschem.022.202202342

S. Kuboon, J. Deng, **M. Gao**, K. Faungnawakij, J. Hasegawa, X. Zhang, L. Shi, and D. Zhang\*

Unraveling the promotional effects of NiCo catalysts over defective boron nitride nanosheets in  
dry reforming of methane, *Catal. Today*, 402, 283-29 (2022) (査読有)

DOI: 10.1016/j.cattod.2022.04.031

Y. Nakakuki, T. Hirose\*, H. Sotome, **M. Gao**, D. Shimizu, R. Li, J. Hasegawa, H. Miyasaka, K.  
Matsuda\*

Doubly linked chiral phenanthrene oligomers for homogeneously  $\pi$ -extended helicenes with large  
effective conjugation length, *Nat. Commun.*, 13, 1475 (2022) (査読有)

DOI: 10.1038/s41467-022-29108-8

Y. Kato, T. Yoshino, **M. Gao**, J. Hasegawa, M. Kojima\*, S. Matsunaga\*

Iron/Photosensitizer Hybrid System Enables the Synthesis of Polyaryl-Substituted  
Azafluoranthenes,

*J. Am. Chem. Soc.*, 144, 2022, 18450-18458 (2023) (査読有)

DOI: 10.1021/jacs.2c06993

Photoinduced Copper-Catalyzed Asymmetric Acylation of Allylic Phosphates with Acylsilanes

Y. Ueda, Y. Masuda, T. Iwai, K. Imaeda, H. Takeuchi, K. Ueno, **M. Gao**, J. Hasegawa, M.  
Sawamura\* *J. Am. Chem. Soc.* 144, 2022, 2218-2224. (2023) (査読有)

DOI: 10.1021/jacs.1c11526

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kato Yoshimi, Yoshino Tatsuhiko, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Kojima Masahiro, Matsunaga Shigeki	4. 巻 144
2. 論文標題 Iron/Photosensitizer Hybrid System Enables the Synthesis of Polyaryl-Substituted Azafluoranthenes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 18450 ~ 18458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c06993	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 Deng Jiang, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Zhang Xiaoyu, Wang Aiyong, Chen Aling, Zhang Dongsong	4. 巻 0
2. 論文標題 Unravelling the Anomalous Coking Resistance over Boron Nitride-Supported Ni Catalysts for Dry Reforming of Methane	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 CCS Chemistry	6. 最初と最後の頁 1 ~ 14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.31635/ccschem.022.202202342	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 Kuboon Sanchai, Deng Jiang, Gao Min, Faungnawakij Kajornsak, Hasegawa Jun-ya, Zhang Xiaoyu, Shi Liyi, Zhang Dongsong	4. 巻 402
2. 論文標題 Unraveling the promotional effects of NiCo catalysts over defective boron nitride nanosheets in dry reforming of methane	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Catalysis Today	6. 最初と最後の頁 283 ~ 291
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cattod.2022.04.031	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 Shipeng Ding, Max J. Hulsey, Hua An, Qian He, Hiroyuki Asakura, Min Gao, Jun-ya Hasegawa, Tsunehiro Tanaka and Ning Yan	4. 巻 3
2. 論文標題 Ionic Liquid-Stabilized Single-Atom Rh Catalyst Against Leaching	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 CCS Chemistry	6. 最初と最後の頁 1814-1822
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.31635/ccschem.021.202101063	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 Nazmul Hasan MD Dostagir, Rattanawalee Rattanawan, Min Gao, Jin Ota, Jun-ya Hasegawa, Kiyotaka Asakura, Atsushi Fukouka, and Abhijit Shrotri	4. 巻 11
2. 論文標題 Co Single Atoms in ZrO <sub>2</sub> with Inherent Oxygen Vacancies for Selective Hydrogenation of CO <sub>2</sub> to CO	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 9450-9461
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.1c02041	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 Min Gao, Ben Wang, Takao Tsuneda, Andrey Lyalin, and Tetsuya Taketsugu	4. 巻 125
2. 論文標題 Catalytic functionalization of hexagonal boron nitride for oxidation and epoxidation reactions by molecular oxygen	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 19219-19228
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c04661	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 M. Gao, M. Nakahara, A. Lyalin, T. Taketsugu	4. 巻 125
2. 論文標題 Catalytic Activity of Gold Clusters Supported on h-BN/Au(111) Surface for Hydrogen Evolution Reaction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 1334, 1344
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c08826	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 S. Yasuda, R. Osuga, Y. Kunitake, K. Kato, A. Fukuoka, H. Kobayashi, M. Gao, J. Hasegawa, R. Manabe, H. Shima, S. Tsutsuminai, T. Yokoi	4. 巻 3
2. 論文標題 Zeolite-supported ultra-small nickel as catalyst for selective oxidation of methane to syngas	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Commun. Chem.	6. 最初と最後の頁 129
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-020-00375-0	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38件(うち招待講演 13件/うち国際学会 14件)

1. 発表者名 Min Gao
2. 発表標題 Importance of systematic geometric searching for computational catalysis
3. 学会等名 The 4th Materials Research Society of Thailand International Conference (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Min Gao
2. 発表標題 Importance of systematic geometric searching for computational catalysis: Case studies in heterogenous catalysis
3. 学会等名 10th edition of the conference of the Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Min Gao
2. 発表標題 Theoretical Investigations on the catalytic activity based on systematic geometric searching
3. 学会等名 7th International Symposium of Quantum Beam Science at Ibaraki University (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Min Gao
2. 発表標題 Importance of systematic searching for computational catalysis
3. 学会等名 Joint Symposium of the Faculty of Pharmaceutical Science & WPI-ICReDD in Hokkaido University (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryota Hara, Min Gao, Hirokazu Kobayashi, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical study on the CH <sub>4</sub> activation by Rh-doped Co cluster
3. 学会等名 The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大城海, 高敏, 長谷川淳也
2. 発表標題 Fe/H <sub>2</sub> S <sub>04</sub> /CeO <sub>2</sub> 脱硝触媒のアルカリ被毒耐性に関する理論的研究
3. 学会等名 第130回触媒討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryota Hara, Min Gao, Hirokazu Kobayashi, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanism investigations on Rh-doped Co cluster catalyzed CH <sub>4</sub> activation
3. 学会等名 Post Symposium of TOCAT9 at Hokkaido University
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kai Oshiro, Min Gao, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Synergistic effect of Fe and H <sub>2</sub> S <sub>04</sub> in Fe/H <sub>2</sub> S <sub>04</sub> /CeO <sub>2</sub> catalyst for enhanced alkali-metal tolerance of NH <sub>3</sub> -SCR: A theoretical investigation
3. 学会等名 12th International Conference on Environmental Catalysis (ICEC2022)
4. 発表年 2022年



1. 発表者名 大城 海, 高 敏, 長谷川 淳也
2. 発表標題 酸化セリウム系脱硝触媒のアルカリ金属被毒耐性メカニズムに関する理論的研究
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 RATTANAWAN Ratanawalee, 高 敏, 井口 翔之, 山中 一郎, 長谷川淳也
2. 発表標題 Ni <sub>2</sub> P 触媒によるメタンの脱水素カップリングの反応機構
3. 学会等名 第52回石油・石油化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 原 綾汰, 高 敏, 小林 広和, 福岡 淳, 長谷川 淳也
2. 発表標題 RhドープCo微粒子触媒のCH <sub>4</sub> 活性化に関する理論的研究
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 M. Gao
2. 発表標題 Importance of systematic geometric searching for computational catalysis
3. 学会等名 The 4th Materials Research Society of Thailand International Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 M. Gao
2. 発表標題 Importance of systematic geometric searching for computational catalysis: Case studies in heterogenous catalysis
3. 学会等名 10th edition of the conference of the Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Gao
2. 発表標題 Theoretical Investigations on the catalytic activity based on systematic geometric searching
3. 学会等名 10th International Symposium of Quantum Beam Science at Ibaraki University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Gao
2. 発表標題 Importance of systematic searching for computational catalysis
3. 学会等名 Joint Symposium of the Faculty of Pharmaceutical Science & WPI-ICReDD in Hokkaido University (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryota Hara, Min Gao, Hirokazu Kobayashi, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical study on the CH <sub>4</sub> activation by Rh-doped Co cluster
3. 学会等名 The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大城海, 高敏, 長谷川淳也
2. 発表標題 Fe/H <sub>2</sub> S <sub>04</sub> /Ce <sub>02</sub> 脱硝触媒のアルカリ被毒耐性に関する理論的研究
3. 学会等名 第130回触媒討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryota Hara, Min Gao, Hirokazu Kobayashi, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanism investigations on Rh-doped Co cluster catalyzed CH <sub>4</sub> activation
3. 学会等名 Post Symposium of TOCAT9 at Hokkaido University (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kai Oshiro, Min Gao, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Synergistic effect of Fe and H <sub>2</sub> S <sub>04</sub> in Fe/H <sub>2</sub> S <sub>04</sub> /Ce <sub>02</sub> catalyst for enhanced alkali-metal tolerance of NH <sub>3</sub> -SCR: A theoretical investigation
3. 学会等名 12th International Conference on Environmental Catalysis (ICEC2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 原 綾汰, 高 敏, 小林 広和, 福岡 淳, 長谷川 淳也
2. 発表標題 RhドーブCo微粒子触媒のCH <sub>4</sub> 活性化に関する理論的研究
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 大城 海, 高 敏, 長谷川 淳也
2. 発表標題 酸化セリウム系脱硝触媒のアルカリ金属被毒耐性メカニズムに関する理論的研究
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 Min Gao
2. 発表標題 Theoretical investigations on the Activation of Small Gas Molecules on free and surface supported metal clusters
3. 学会等名 International Symposium on Air Pollution Control Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Min Gao
2. 発表標題 Theoretical simulations of heterogeneous catalysis
3. 学会等名 12th CSE Autumn School & the 9th ALP International Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Min Gao
2. 発表標題 Tunable catalytic performance of metal clusters by morphology control
3. 学会等名 International Conference on Advanced Catalysts for Energy and Environmental Applications (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高敏
2. 発表標題 系統的な構造計算に基づく金属クラスターの触媒活性に関する理論研究
3. 学会等名 第128回触媒討論会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大城海，高敏，長谷川淳也
2. 発表標題 NH3-SCR反応に用いられるFe/H2SO4修飾CeO2触媒のアルカリ金属被毒耐性 メカニズムに関する理論的研究
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2022年冬季研究発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高敏，大城海，長谷川淳也，原淵祐，前田理
2. 発表標題 排ガス浄化に必須となるアルカリ被毒耐性を備えた次世代脱硝触媒の理論解析
3. 学会等名 第7回北大・部局横断シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Rattanawale Rattanawan, Min Gao, Ichiro Yamanaka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanisms study on nonoxidative coupling of methane catalyzed by Nickle phosphide
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 原綾汰, 高敏, 小林広和, 福岡淳, 長谷川淳也
2. 発表標題 RhドーブCo微粒子触媒のCH4活性化に関する理論的研究
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 大城海, 高敏, 長谷川淳也
2. 発表標題 Fe/SO42-/CeO2触媒を用いたNH3-SCR法におけるアンモニア吸着過程とアルカリ金属被毒耐性に関する理論的研究
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 Rattanawale Rattanawan, 高敏, 山中 一郎, 長谷川 淳也
2. 発表標題 Direct Dehydrogenative Conversion of Methane into C2 Hydrocarbon over Nickel Phosphide Active Catalyst: Theoretical Study
3. 学会等名 第128回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大城 海、高 敏、長谷川 淳也
2. 発表標題 アルカリ被毒耐性を有する脱硝Fe/SO42-/CeO2触媒のアンモニア吸着過程に関する理論的研究
3. 学会等名 第128回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大城 海, 高 敏, 長谷川 淳也
2. 発表標題 Fe/SO42-/CeO2触媒を用いた NH3-SCR メカニズムに関する理論的研究
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 Min Gao
2. 発表標題 Theoretical investigations on Catalytic activity of metal clusters Online Video International Symposium on Advanced Catalyst Design and Molecular Catalysis
3. 学会等名 International Symposium on Advanced Catalyst Design and Molecular Catalysis, Invited Talk (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 原 綾汰・高 敏・小林 広和・福岡 淳・長谷川 淳也
2. 発表標題 RhドーブCo微粒子触媒のCH4活性化に関する理論的研究
3. 学会等名 第126回触媒討論会 ポスター発表
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kai Shiro, Min Gao, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanistic Study on the Selective Catalytic Reduction of NOx Catalyzed by Fe/SO42-/CeO2 with NH3
3. 学会等名 第4回国際統合物質シンポジウム ポスター発表 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Rattanawalee Rattanawan, Min Gao, Ichiro Yamanaka and Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical investigations on of C-C Coupling versus C-H Coupling on Fe-base Catalyst
3. 学会等名 第126回触媒討論会 ポスター発表
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大城 海, 高 敏, 長谷川 淳也
2. 発表標題 Fe/SO42-/CeO2触媒によるNH3を用いたNOX還元反応メカニズムに関する理論的研究
3. 学会等名 第127回触媒討論会 ポスター発表
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

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			
中国	上海大学			
シンガポール	シンガポール国立大学			