

令和 6 年 4 月 8 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04996

研究課題名（和文）軌道相関図の表面科学への応用

研究課題名（英文）Application of Orbital Correlation Diagrams to Surface Science

研究代表者

辻 雄太 (Tsuji, Yuta)

九州大学・総合理工学研究院・准教授

研究者番号：80727074

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：分子系の反応において、反応の進行しやすさを判断するために、軌道相関図が用いられることがある。本研究では、表面反応にもこれを適用することで、単原子合金表面上でのメタンからエタンへの非酸化のカップリング反応を最適化することが可能であるということが示された。さらに、様々な表面過程（接着など）の解析においても、結晶軌道に基づいた解析の有用性が示された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題において、我々は有機化学や有機金属化学において活性化エネルギーの理解に大きな役割を果たしてきた軌道相関図の方法を固体表面のバンド計算と組み合わせることで、それを表面反応に適用し、従来の不均一触媒反応の理論的研究とは一線を画したアプローチをとることが可能であることを示した。そのような観点から、本研究は非常に学術的独自性に富んでいると言える。さらに、新規のアプローチの確立を達成した点は意義深いと考える。

研究成果の概要（英文）：In molecular reactions, orbital correlation diagrams are sometimes used to determine the ease with which a reaction proceeds. In this study, it was shown that this can also be applied to surface reactions to optimize the non-oxidative coupling reaction from methane to ethane on monatomic alloy surfaces. Furthermore, the usefulness of crystal orbital-based analysis in analyzing various surface processes (e.g., adhesion) was also demonstrated.

研究分野：基礎物理化学

キーワード：表面科学 結晶軌道 軌道相関図 Walsh図 第一原理計算

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。

1. 研究開始当初の背景

軌道相関図は、同じ対称性の軌道は交差できないとする非交差則に基づいて、反応物の軌道と生成物の軌道との相関を示す図のことである。Woodward と Hoffmann は軌道相関図に基づいて、Woodward-Hoffmann 則を提唱した。分子同士の反応であれば、軌道相関図を描くことで、「なぜ活性化エネルギーが高いのか？」という化学反応の根本的な問題に答えることが可能である。しかしながら、多くの工業的に興味を持たれる触媒反応は、通常、固体表面上で起きるため、反応物および生成物の電子状態は分子軌道ではなく、バンドで記述される。従って、このような軌道相関図の方法を直接適用することは困難である。

近年、研究代表者らはこの問題を解決するため、表面反応に軌道相関図を適用する研究を行ってきた。具体的には Nudged Elastic Band (NEB) 法などで対象とする表面反応の遷移状態を探し、反応物から生成物へと至る最小エネルギー経路を得、経路上の各点でバンド計算を行い、各バンド(軌道)のエネルギーを生成物側から反応物側へ連続的に繋げていくというものである。応募者は酸化物表面上でのメタンの C-H 結合の切断反応について、逆格子空間の Γ 点でのバンド計算をもとに表面反応に対する軌道相関図を作成した。この図の解析から、この反応においては、酸化物表面の配位不飽和な遷移金属の d_{z^2} 軌道とメタンの σ_{C-H} 軌道との相互作用が重要であることが明らかとなった。また、軌道相関図から、 d_{z^2} 軌道のエネルギー準位を下げることであれば、この反応の活性化エネルギーが下げられることも明らかとなった。以上が本研究開始当初の背景である。

2. 研究の目的

研究代表者らが開発している表面反応の軌道相関図の方法はまだ基礎的な段階にあった。研究開始当初は、その手法は酸化物表面上でのメタンの C-H 結合切断反応にしか適用されていなかった。そこで、軌道相関図の方法を C-H 結合切断反応以外の反応にも適用しその有効性を検証することを本研究課題の第一の目的とした。さらに、その有効性が確認されれば、軌道相関図の方法によって明らかとなる活性化エネルギーの起源に基づいて、律速段階の活性化エネルギーを制御し、新規の固体触媒を理論先導で提案するということを本研究課題の第二の目的とした。

3. 研究の方法

本研究では、周期境界条件を課したスラブモデルを用いて表面をシミュレートする手法を用いた。第一原理計算により、表面反応の最小エネルギー経路をまず求めた。その経路上の各点でバンド計算を行い、バンドのエネルギーを反応座標に沿って連続的に繋げていくことで表面反応に対する軌道相関図を取得する方法を確立した。得られた相関図をもとに、反応の活性化エネルギーに大きな影響を与えている軌道を特定した。表面改質などを通して、軌道エネルギーに摂動を与え、活性化エネルギーを調整し、触媒反応全体を最適化することを試みた。このようなサイクルを種々の触媒表面に適用することで、新規の触媒を設計した。

4. 研究成果

本研究の代表的な成果は下記の2つである。

[1] β -PtO₂ 表面におけるメタン-メタノール変換反応の解析

メタンの C-H 結合は非常に強いが、 β -PtO₂ の (110) 面では簡単に解離する。これは、配位的に不飽和な白金原子と表面上の CH₃ との間に、非常に安定な白金-炭素結合が形成されるためである。この白金-炭素結合の安定性により、CH₃ は表面に強く結合する。メタンからメタノールを合成する場合、反応過程で白金-炭素結合が切断され、C-O 結合を形成する必要がある。しかし、 β -PtO₂ 表面ではこれが起こりにくい。このプロセスの活性化エネルギーは 47.9 kcal/mol と非常に大きいことが計算された。そこで、C-H 結合の活性化能力を維持したまま、Pt-C 結合を弱めるような表面修飾を行えば、C-H 結合切断と C-O 結合形成の機能を兼ね備えた触媒を創り出すことができると考えられる。そのためには、表面の軌道相互作用を解析することが非常に有効であることが示された。研究代表者らは C 原子の位置に対してトランスに位置する O 原子を N 原子に置き換えることで Pt-C 結合を弱めることができることを予測した。これは、 β -PtO₂ が複合アニオン化合物になるための一種の過程であるとも考えられる。密度汎関数理論に基づく β -PtO₂ 表面の触媒反応のシミュレーションでは、N をドーピングすることによってメタノール合成の律速段階における活性化エネルギーが 27.7 kcal/mol に減少することが示された。また、研究代表者らは β -PtO₂ に関する知見を拡張して α -PtO₂ に関する解析も行い、実験研究者と共同で、軌道相互作用に着目した表面の理論的解析手法の有効性を確認した。以上のような成果をまとめて、下記の論文を出版した。

Tsuji, Y.; Kurino, K.; Yoshizawa, K. Mixed Anion Control of Partial Oxidation of Methane to Methanol on the β -PtO₂ Surface. *ACS Omega* **2021**, *6*, 13858-13869. DOI: 10.1021/acsomega.1c01476

Takagaki, A.; **Tsuji, Y.**; Yamasaki, T.; Kim, S.; Shishido, T.; Ishihara, T.; Yoshizawa,

[2]単原子合金表面におけるメタンの非酸化的カップリング反応の解析

触媒表面に CH_4 が酸化的に付加すると、 CH_3 と H が生成する。表面で生成した CH_3 種が互いにカップリングすれば、 C_2H_6 の還元的脱離が達成されるだろう。同様に、 H がカップリングして H_2 を形成することも可能であろう。これがメタンの非酸化的カップリング (NOCM) の機構の概略である。一般的な白金触媒表面でこの反応を達成するのは非常に難しい。メタンが過剰酸化され、コーキングが発生するからである。本研究課題で、研究代表者らは有機金属化学や錯体化学の概念に基づき、分子科学的な側面からこの問題にアプローチする方法論を確立した。Walsh ダイアグラム の概念を表面反応に拡張して得られたダイアグラムを活用する方法の有効性が検証された。金属触媒表面における C-H 結合の活性化、すなわち酸化的付加反応と、C-C 結合および H-H 結合の形成、すなわち還元的脱離反応について、軌道理論の観点から徹底的に検討を重ねた。構造の最適化と正確なエネルギー計算のための密度汎関数理論 (DFT) 計算によるスラブモデルシミュレーションを活用した。結晶軌道のエネルギー変化と相互作用の詳細な解析のための拡張ヒュッケル法が、本研究における DFT の活用に対して相補的な役割を果たした。NOCM の実現に向けた解析の結果、単金属触媒の限界が確認された。そこで、研究代表者らは、単原子合金 (SAA) 触媒の合理的な設計を試みた。その結果、 $\text{Pt}_1/\text{Au}(111)$ SAA 触媒の NOCM に対する有効性が理論的に提案された。このような SAA 表面では、不活性な Au 原子の海の中に単一の Pt 単原子サイトが存在する構造が検討された。このような触媒表面は、メタン分子の過剰酸化を抑制し、エタン分子の還元的脱離を促進するために望ましい表面電子状態を実現していることが明らかとなった。以上のような成果をまとめて、下記の論文を出版した。

Tsuji, Y.; Yoshida, M.; Kamachi, T.; Yoshizawa, K. Oxidative Addition of Methane and Reductive Elimination of Ethane and Hydrogen on Surfaces: From Pure Metals to Single Atom Alloys. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 18650–18671. DOI: 10.1021/jacs.2c08787

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計27件（うち査読付論文 27件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 TSUJI Yuta	4. 巻 66
2. 論文標題 Analysis of Metal Clusters Based on Graph-Theoretic Interpretation of the Lowest Occupied Molecular Orbital	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Vacuum and Surface Science	6. 最初と最後の頁 158 ~ 163
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/vss.66.158	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 Yamada Yasuyuki, Morita Kentaro, Sugiura Takuya, Toyoda Yuka, Mihara Nozomi, Nagasaka Masanari, Takaya Hikaru, Tanaka Kiyohisa, Koitaya Takanori, Nakatani Naoki, Ariga-Miwa Hiroko, Takakusagi Satoru, Hitomi Yutaka, Kudo Toshiji, Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari, Tanaka Kentaro	4. 巻 3
2. 論文標題 Stacking of a Cofacially Stacked Iron Phthalocyanine Dimer on Graphite Achieved High Catalytic CH ₄ Oxidation Activity Comparable to That of pMMO	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 JACS Au	6. 最初と最後の頁 823 ~ 833
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacsau.2c00618	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 Takagaki Atsushi, Tsuji Yuta, Yamasaki Tatsuya, Kim Sun, Shishido Tetsuya, Ishihara Tatsumi, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 59
2. 論文標題 Low-temperature selective oxidation of methane to methanol over a platinum oxide	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 286 ~ 289
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CC05351A	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 Ikemoto Satoru, Muratsugu Satoshi, Koitaya Takanori, Tsuji Yuta, Das Mowpriya, Yoshizawa Kazunari, Glorius Frank, Tada Mizuki	4. 巻 145
2. 論文標題 Coordination-Induced Trigger for Activity: N-Heterocyclic Carbene-Decorated Ceria Catalysts Incorporating Cr and Rh with Activity Induction by Surface Adsorption Site Control	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 1497 ~ 1504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c07290	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 Okazawa Kazuki, Tsuji Yuta, Kurino Keita, Yoshida Masataka, Amamoto Yoshifumi, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 7
2. 論文標題 Exploring the Optimal Alloy for Nitrogen Activation by Combining Bayesian Optimization with Density Functional Theory Calculations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 45403 ~ 45408
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c05988	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 Tsuji Yuta, Yoshida Masataka, Kamachi Takashi, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 144
2. 論文標題 Oxidative Addition of Methane and Reductive Elimination of Ethane and Hydrogen on Surfaces: From Pure Metals to Single Atom Alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 18650 ~ 18671
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c08787	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 Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 126
2. 論文標題 Adsorption Site Preference Determined by Triangular Topology: Application of the Method of Moments to Transition Metal Surfaces	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 13505 ~ 13519
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c04656	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 Masataka, Tsuji Yuta, Iguchi Shoji, Nishiguchi Hikari, Yamanaka Ichiro, Abe Hideki, Kamachi Takashi, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 12
2. 論文標題 Toward Computational Screening of Bimetallic Alloys for Methane Activation: A Case Study of MgPt Alloy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 9458 ~ 9472
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.2c01601	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 Nakamura Shin、Yamamoto Satoru、Tsuji Yuta、Tanaka Keiji、Yoshizawa Kazunari	4. 巻 38
2. 論文標題 Theoretical Study on the Contribution of Interfacial Functional Groups to the Adhesive Interaction between Epoxy Resins and Aluminum Surfaces	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 6653 ~ 6664
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.2c00529	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 Sumiya Yosuke、Tsuji Yuta、Yoshizawa Kazunari	4. 巻 7
2. 論文標題 Peel Adhesion Strength between Epoxy Resin and Hydrated Silica Surfaces: A Density Functional Theory Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 17393 ~ 17400
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c01544	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 Okazawa Kazuki、Tsuji Yuta、Yoshizawa Kazunari	4. 巻 156
2. 論文標題 Graph-theoretical exploration of the relation between conductivity and connectivity in heteroatom-containing single-molecule junctions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 091102 ~ 091102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0083486	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 Tsuji Yuta、Okazawa Kazuki、Kurino Keita、Yoshizawa Kazunari	4. 巻 126
2. 論文標題 Topology Dictates Magnetic and Conductive Properties of a π -Stacked System: Insight into Possible Coexistence of Magnetic and Conductive Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 3244 ~ 3256
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c10502	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 Sumiya Yosuke, Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 24
2. 論文標題 Shear adhesive strength between epoxy resin and copper surfaces: a density functional theory study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 27289 ~ 27301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP03354B	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 Asano Shusaku, Adams Samuel J., Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari, Tahara Atsushi, Hayashi Jun-ichiro, Cherkasov Nikolay	4. 巻 7
2. 論文標題 Homogeneous catalyst modifier for alkyne semi-hydrogenation: systematic screening in an automated flow reactor and computational study on mechanisms	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Reaction Chemistry & Engineering	6. 最初と最後の頁 1818 ~ 1826
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2RE00147K	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 Hori Mikiya, Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 23
2. 論文標題 Bonding of C1 fragments on metal nanoclusters: a search for methane conversion catalysts with swarm intelligence	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 14004 ~ 14015
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP00345C	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 Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 6
2. 論文標題 From Infection Clusters to Metal Clusters: Significance of the Lowest Occupied Molecular Orbital (LOMO)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 1339 ~ 1351
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c04913	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 Tsuji Yuta, Okazawa Kazuki, Kobayashi Yoji, Kageyama Hiroshi, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 125
2. 論文標題 Electronic Origin of Catalytic Activity of TiH ₂ for Ammonia Synthesis	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 3948 ~ 3960
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c10907	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 Tsuji Yuta, Baba Taiki, Tsurumi Naoaki, Murata Hiroyuki, Masago Noriyuki, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 37
2. 論文標題 Theoretical Study on the Adhesion Interaction between Epoxy Resin Including Curing Agent and Plated Gold Surface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 3982 ~ 3995
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.1c00285	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 Tsuji Yuta, Kurino Keita, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 6
2. 論文標題 Mixed Anion Control of the Partial Oxidation of Methane to Methanol on the -PtO ₂ Surface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 13858 ~ 13869
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c01476	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 Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 37
2. 論文標題 Competition between Hydrogen Bonding and Dispersion Force in Water Adsorption and Epoxy Adhesion to Boron Nitride: From the Flat to the Curved	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 11351 ~ 11364
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.1c01935	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 Tsuji Yuta, Yoshioka Yuta, Hori Mikiya, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 65
2. 論文標題 Exploring Metal Cluster Catalysts Using Swarm Intelligence: Start with Hydrogen Adsorption	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Topics in Catalysis	6. 最初と最後の頁 215 ~ 227
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11244-021-01512-2	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 Tsurumi Naoaki, Tsuji Yuta, Masago Noriyuki, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 6
2. 論文標題 Elucidation of Adhesive Interaction between the Epoxy Molding Compound and Cu Lead Frames	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 34173 ~ 34184
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c05914	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 Nakamura Shin, Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 37
2. 論文標題 Molecular Dynamics Study on the Thermal Aspects of the Effect of Water Molecules at the Adhesive Interface on an Adhesive Structure	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 14724 ~ 14732
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.1c02653	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 Tsurumi Naoaki, Tsuji Yuta, Baba Taiki, Murata Hiroyuki, Masago Noriyuki, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 98
2. 論文標題 Comparative study of the ideal and actual adhesion interfaces of the die bonding structure using conductive adhesives	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Adhesion	6. 最初と最後の頁 24 ~ 48
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00218464.2020.1807958	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 Tsuji Yuta, Okazawa Kazuki, Kurino Keita, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 126
2. 論文標題 Topology Dictates Magnetic and Conductive Properties of a π -Stacked System: Insight into Possible Coexistence of Magnetic and Conductive Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 3244 ~ 3256
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c10502	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 Okazawa Kazuki, Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 156
2. 論文標題 Graph-theoretical exploration of the relation between conductivity and connectivity in heteroatom-containing single-molecule junctions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 091102 ~ 091102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0083486	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 Noboru, Ryuzaki Sou, Tsuji Yuta, Noguchi Yutaka, Matsuda Rintaro, Wang Pangpang, Tanaka Daisuke, Arima Yusuke, Okamoto Koichi, Yoshizawa Kazunari, Tamada Kaoru	4. 巻 2
2. 論文標題 Effect of chemically induced permittivity changes on the plasmonic properties of metal nanoparticles	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 54
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-021-00159-6	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19件 (うち招待講演 8件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 岡澤 一樹 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 積層 共役単分子接合の電気伝導特性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 岡澤 一樹 栗野 啓太、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスに基づいた窒素活性化合金触媒の探索
3. 学会等名 第59回化学関連支部合同九州大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 モーメントを用いた表面幾何構造の理解
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 辻雄太 堀幹矢、吉澤一成
2. 発表標題 群知能を用いた金属クラスター触媒の探索
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 岡澤 一樹 辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 単一 積層分子接合の伝導特性に関する理論的研究
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 岡澤 一樹辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 芳香族性を有する スタック単分子接合の伝導特性に関する理論的研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022秋季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuta Tsuji
2. 発表標題 Understanding Adsorption Site Preference Based on the Topology of the Adsorption Interface
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry Kota Kinabalu (ICPAC KK) 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 量子化学計算に基づいた接着界面の分子論的描像
3. 学会等名 接着・接合技術コンソーシアム 第18回企業ワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 固体と分子の相互作用に関する軌道原理
3. 学会等名 第1回 超セラミックス 研究講演会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 情報科学的手法の物質科学への応用
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会(2023) (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 辻雄太吉田将隆、蒲池高志、吉澤一成
2. 発表標題 軌道相関図を用いた非酸化的メタンカップリング反応の理論的研究
3. 学会等名 第131回触媒討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 辻雄太、吉澤一成
2. 発表標題 最低被占軌道について
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 中村伸、辻雄太、吉澤一成
2. 発表標題 量子化学計算による水和表面におけるエポキシ樹脂の接着相互作用の解析
3. 学会等名 第70回高分子学会年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 辻雄太、馬場太基、鶴見直明、村田裕幸、真砂紀之、吉澤一成
2. 発表標題 エレクトロニクスにおける接着界面の理論的研究
3. 学会等名 第70回高分子討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuta Tsuji
2. 発表標題 Reactivity and Properties of Metal Clusters
3. 学会等名 The 21st International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 化学グラフ理論による物質解析
3. 学会等名 第15回 物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 金属クラスターの反応と物性に関する理論的研究
3. 学会等名 触媒インフォマティクス研究会 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuta Tsuji, Kazunari Yoshizawa
2. 発表標題 Mixed Anion Control of Catalytic Activity
3. 学会等名 International Conference on Mixed-Anion Compounds (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 情報科学的手法を活用した物質解析・物質探索
3. 学会等名 総理工情報科学セミナー (招待講演)
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