

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 7 月 1 日現在

機関番号：10101

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2015～2019

課題番号：15H05805

研究課題名(和文) 生体触媒反応場の精密制御に資する理論計算手法の開発と応用

研究課題名(英文) Development and application of computational methods toward controlling the active site of bio-catalysts

研究代表者

長谷川 淳也 (Hasegawa, Jun-ya)

北海道大学・触媒科学研究所・教授

研究者番号：30322168

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 33,200,000円

研究成果の概要(和文)：本課題の目的は、生体触媒やそれに類する反応場における触媒機構の解析を通し、「精密制御反応場」領域の構築に寄与することである。鉄イオンを含む生体触媒反応でみられる系間交差を経る反応経路を決定する課題を解決し、幾つかの金属錯体における分子吸着の反応機構を明らかにするとともに、配位子の設計指針を提案した。また、ミオグロビンが示す触媒反応の系間交差メカニズムを研究し、実験グループと共に再構成ミオグロビンが示す触媒活性の起源を明らかにした。さらに、領域内共同研究によって反応機構の解析に協力し、多くの優れた触媒系の物理化学的特徴を明らかにした。その結果、46報の原著論文(うち領域内15報)を出版できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

精密制御反応場の代表的な例である生体触媒を理解する上で、活性中心を構成する鉄イオンなどの遷移金属元素が示す系間交差を含む反応の機構を明らかにする計算手法を開発する必要があった。この課題を解決し、ミオグロビンを含む幾つかの系に応用して反応機構を明らかにするとともに、配位子設計の指針を明らかにした。また、柔らかい生体分子に特徴的な構造ゆらぎの問題について、系間交差を経由する自由エネルギー面の計算を試み成果を得た。さらに、領域内の実験グループと協力し、二酸化炭素から高分子を合成する触媒反応をはじめとする多くの優れた触媒反応の反応機構を明らかにし、反応場の精密制御に貢献した。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this project is to contribute to the construction of a precisely controlled reaction field through the analysis of catalytic mechanisms in biocatalysts and similar reaction fields. We have developed a method for determining the reaction pathways through inter-system crossings in biocatalytic reactions, applied to the reaction mechanism of molecular adsorption in some metal complexes, and proposed guidelines for the ligand design. We also studied the inter-system crossing mechanisms of the catalytic reactions exhibited by myoglobin and, together with an experimental group, elucidated the origin of the catalytic activity exhibited by reconstituted myoglobin. In addition, we have collaborated on the analysis of reaction mechanisms through the collaborative researches and have clarified the physicochemical characteristics of a number of excellent catalytic systems. As a result, we were able to publish 38 original papers (including 13 in the area).

研究分野：触媒理論化学

キーワード：生体触媒 系間交差 ポテンシャルエネルギー面 触媒設計

様式 C-19, F-19-1, Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

酵素などに代表される生体触媒は、精密に制御された反応場の代表例であると考えられる。酵素反応のメカニズムに関する計算化学的研究は、これまで多くがなされてきているが最も大きな課題は、系間交差を経由する反応経路を求めることであった。

また、当該新領域研究である「精密制御反応場」領域に参画する研究者は、優れた反応性を示す触媒あるいは新奇な反応性を示す触媒に関する研究を行っている。我々の研究グループは、当該領域における数少ない計算化学研究グループとして、これらの実験研究者と反応メカニズムについて共同研究を行い、新領域開拓に貢献することを目指した。

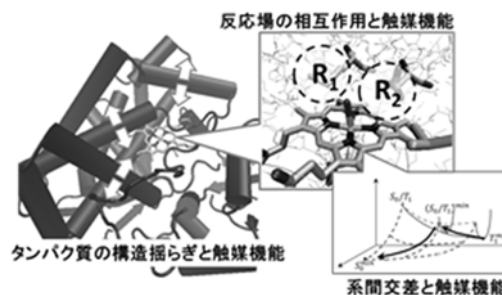


Figure 1. Our research directions: catalytic functions in biomolecules and related compounds.

2. 研究の目的

生体触媒に特徴的な計算化学の課題を解決するためには、系間交差を経る反応経路を研究する必要がある。計算化学的には、反応経路上に存在する系間交差点は、異なる二つのポテンシャル面が交差する超曲面におけるエネルギー極小点として定義される。この系間交差点における分子の構造を決定するための計算手法を開発する。次に、反応経路上における始状態から系間交差点を経て、終状態に至る反応経路を決定し、反応物が生成物に変換される際の分子構造変化を明らかにする。さらに、生体触媒に特有な構造ゆらぎを取り込んだ反応経路を理解することが求められる。この課題についても、系間交差を経由する問題の解決方法の提案を目指す。

3. 研究の方法

(1) 系間交差反応における遷移状態を計算する理論計算手法の開発と応用

開発した手法の有効性を確認するために、幾つかの系に応用を行った。異なる二つのスピン状態のポテンシャル面が形成する交差面上の極小点 (MEISCP) が遷移状態となり、反応性を決める重要な因子になる例が多く見受けられる。[MoCp₂]の基底状態は三重項状態であるが、配位子が付加した [MoCp₂L] (L=CO, H₂) は一重項状態であるため、これらの配位子結合反応は系間交差を経由するスピン禁制反応である。CO の場合、三重項状態の極小点近傍に MEISCP が見出されたのに対し、H₂ では MEISCP がエネルギー的に高い位置に見出された。この結果は、CO の結合は容易であるが、水素分子ではより高い温度圧力が必要であるという実験結果をよく説明する。

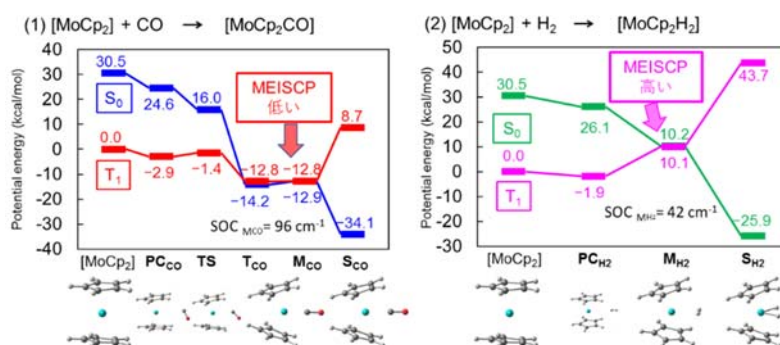


Figure 2. Potential energy profiles of (1) CO and (2) H₂ binding to molibudenocene.

(2) ヘムの酸素結合における系間交差遷移状態と反応座標²

同様に、ヘムの酸素結合にも応用した。ヘムは 2 個の鉄原子イオンとポルフィリンからなる錯体であり、生体中では、酸素の運搬や酵素反応の活性中心となっている。ヘムの酸素結合は系間交差を含み、3重項状態(解離状態 T_{1o}[デオキシヘム(5重項)+O₂(3重項)])から1重項状態(結合状態 S_{0min}[オキシヘム])へと変化する。これまで系間交差によって生じる遷移状態の構造や反応座標に関する報告はされていなかった。

酸素分子は Fe—O 距離約 2.9 Å において、三重項のエネルギー極小点 T_{1min} に到達する。最小エネルギー経路に沿った場合、Fe—O 距離が 2.0 Å において一重項状態と交差する(図 3a)。他方で、MEISCP は Fe—O 距離が 2.2 Å の位置にあり、T_{1min} からエネルギーがわずか 1.0 kcal/mol 高い位置に見出された。T_{1min} から MEISCP に至る構造変化を解析したところ、一重項と三重項状態のエネルギーが縮重するためには、Fe-O 距離と関連しない変位である、ポルフィリン環の対称伸縮が有効であるこ

とが分かった。即ち、MEISCP に到達するためには、主反応座標に加えて、エネルギーを縮減させる反応座標が有効であることが分かった。

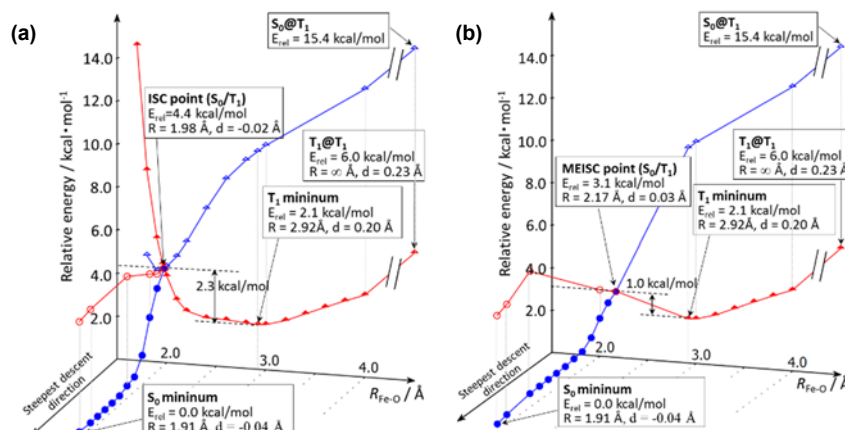


Figure 3. Potential energy surface of spin-state crossing (a) via intersystem crossing point (ISP) on IRC and (b) via MEISCP.

(3) 系間交差を経る反応経路を決定するアルゴリズムの開発⁴
 ミオグロビンにおけるシクロプロパン化反応の研究(林研究室との共同研究)を通して、系間交差を経る反応経路の研究には自動的に反応経路を見出す方法の開発が必要であることを認識した。そこで、反応経路の決定に用いられる Nudged Elastic Band 法に系間交差点を見出す機能を付与する新しい計算手法を開発した。Fig. 4 に示すように、反応途中での交差を自動的に見出すことに成功した。今後はより多くの系に応用して、汎用性を高める計画である。

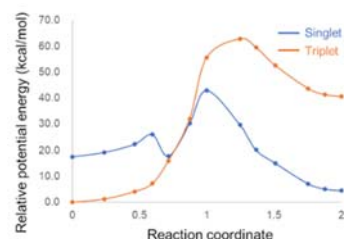


Figure 4. Automatically determined reaction pathway including intersystem crossing. Case of CH activation by CoH catalyst.

(4) 物性値を拘束条件とする分子の構造最適化手法の開発⁵
 上述の方法の開発成果に派生した研究成果も得られている。表面や溶液内における反応系は多様な分子種や分子構造に由来する複雑分子系である。そのような場合、ポテンシャル曲面が複雑であり、従来のやり方では構造決定が困難な場合が多い。本研究ではこのような問題に対して、実験の観測結果を計算条件の一部とした構造最適化計算の手法を提案した。これにより、初めから観測結果あるいは物性値を理論計算に取り入れることにより、探索する空間を制限し、実験データと理論値を比較する手間や恣意的なモデル作成による誤差を軽減できた。

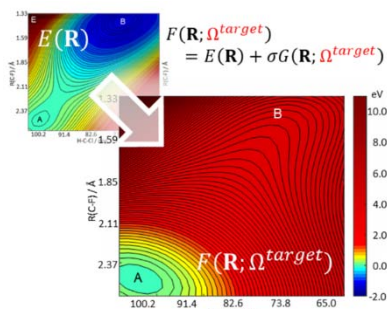


Figure 5. Constraint-modified energy surface of a S_N2 reaction.

4. 研究成果

(1) 再構成ミオグロビンにおけるシクロプロパン化反応の系間交差メカニズム⁶

ミオグロビン(nMb)中のポルフィリン錯体をポルフィセン錯体に置き換えた再構成ミオグロビン(rMb)は、シクロプロパン化反応において nMb より格段に高い活性を示すことが大阪大学・林グループによって示された。カルベン中間体の生成が律速段階であるという実験結果をふまえ、我々は nMb と rMb におけるカルベン生成のポテンシャル面を研究した。

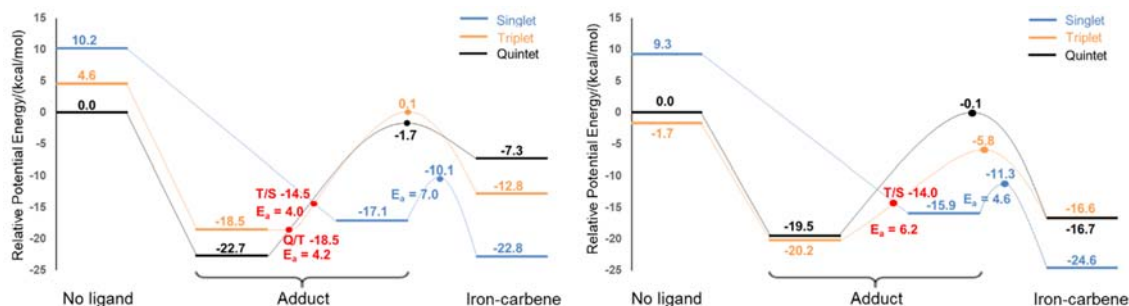


Figure 6. Potential energy profile for the carbene formation from ethyl diazoacetate by (left) nMb and (right) rMb.

基質であるエチルジアゾアセテート(EDA)が前駆錯体を形成するまでは高スピン状態(5重項)が最も安定であるが、鉄カルベン錯体は低スピン状態(1重項)が最も安定であった。従って、この反応経路には少なくとも2回の系間交差が含まれることが分かる(Fig. 6 左)。さらに、前駆錯体は、高スピン状態と中間スピン状態(3重項)、及びそれらの系間交差点の構造は極めて似通っており、仮に中間状態に遷移しても容易に安定な高スピン状態に緩和して、反応が進行しにくくなっている。他方で、Fig. 6 右に示すように、再構成ミオグロビンの前駆錯体では中間スピン状態が最も安定であるため、一度の系間交差で1重項鉄カルベン状態を生成できることが分かった。

(2) 二官能性ポルフィリン触媒による高効率二酸化炭素固定メカニズム⁷⁻¹⁰

二酸化炭素をエポキシドと高効率で反応させる二官能性ポルフィリン触媒が岡山大学の依馬らによって合成され、高いTON(=103000), TOF(=12000 h⁻¹)を示すことが報告された⁹。本研究では、密度汎関数理論(DFT)による計算を行い、反応中間体や遷移状態などのポテンシャルエネルギープロファイルを計算し、反応機構と特徴的な官能基の役割について解析した。また、4級アンモニウム錯体での同反応について¹¹、反応座標を詳細に検討して、二官能性触媒構造の優位性を明らかにした。

(3) 二官能性アルミニウムポルフィリン触媒による二酸化炭素とシクロヘキセンオキシドの共重合反応機構¹²

野崎研究室と依馬研究室は二官能性アルミニウムポルフィリンが、二酸化炭素とシクロヘキセンオキシド(CHC)の共重合反応を触媒し、優れた触媒性能(TOF18,000 h⁻¹, 選択性99%)を示すことを明らかにした。本研究では、共重合反応とそれに競合する環状カーボネート生成反応について、DFT計算を用いてポテンシャルエネルギー面の解析を行った。

共重合反応の律速段階は、新規モノマーであるCHCに中間体のカーボネートが求核攻撃して、三員環が開環する過程(Fig. 7のTS3b)である。他方で、環状カーボネートの生成反応の律速段階は、中間体のカーボネートが求核的に五員環を生成する過程(Fig. 7のTS3a)であった。計算された活性化エネルギーは共重合反応の方が14 kcal/mol程度小さく、選択性の起源になっていると考えられる。また、ポルフィリン触媒の置換基であるオニウム塩は、負電荷を持つ中間体と相互作用し、反応サイトに強く結合して触媒毒となることを防ぎ、同時に中間体が系中に散逸することを防ぐ役割を持つことがモデル計算による解析により明らかになった。また、中心金属をMgとした場合について比較検討を行ったところ、ルイス酸性の強いAlイオンが、エネルギー的に不安定なエポキシドの開環体を安定化する効果があることが明らかになった。

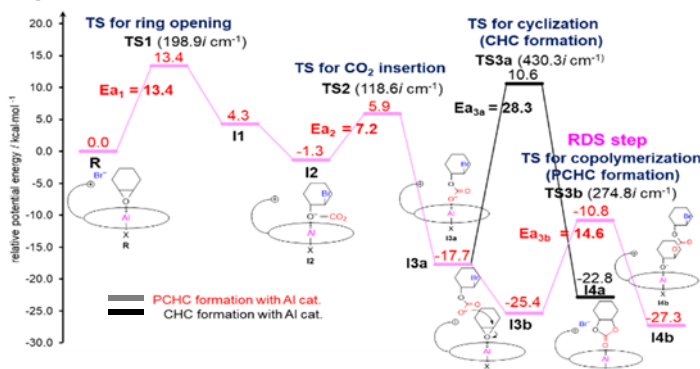


Figure 7. Potential energy profiles for bifunctional Al-porphyrin¹² catalyzed copolymerization reactions for PCHC synthesis from cyclohexeneoxide and CO₂.

(4) Au/OMS-2 触媒によるピペリジン分子の C-H 結合活性化機構に関する理論的研究¹³

山口研究室によって、OMS-2 担体に金ナノ粒子を担持した Au/OMS-2 触媒は、窒素等のヘテロ原子を含むケトン種の脱水素反応に対し高い活性を示すことが明らかにされた¹⁴。本研究では反応機構を明らかにするため、DFT 計算を用いて Au/OMS-2 触媒上でのピペリジンの脱水素反応機構の解析を行った。その結果、負電荷を帯びた金クラスターによって活性化された酸素分子による C-H 結合開裂機構が見出された。

(5) 白金触媒によるエチレンの酸化メカニズムに関する理論的研究¹⁵

メソポーラスシリカに白金ナノ粒子を担持した触媒が、0°C付近の低温においてもエチレンを完全酸化することが、北大・福岡グループにより報告されている。そこで本研究では、白金ナノ粒子のモデル反応系を構築し、量子化学計算を用いてエチレンの完全酸化に至る反応経路と、反応における担体の効果を解析した。エチレンジオキシド中間体から C-C σ 結合が解裂してホルムアルデヒドが生成する経路が見出され、そのエネルギー障壁が、担体の効果で 6.4 kcal/mol に低下するという結果が得られた。

これは遷移状態における軌道間相互作用に起因することが明らかになった。

(6) 白金触媒によるカルボニル化合物のヒドロシリル化に関する理論的研究¹⁶

白金触媒によるカルボニル化合物のヒドロシリル化において、2つのSi-H基が近接した場合に、反応が加速することを、九大・永島研究室が見出している。本研究では、この反応性向上の原因を理論面から明らかにすることを目的とした研究を行っている。密度汎関数法による計算解析から、カルボニル化合物のヒドロシリル化が特異な5配位中間体を経て、Chalk-Harrod機構で進行することが明らかになった。一般的に、ケイ素と酸素の親和性が高いことから、カルボニル化合物のヒドロシリル化は modified Chalk-Harrod 機構や、近年注目を集めている外圏機構で進行するというのが定説だが、今回の結果は、その例外にあたり、カルボニル化合物のヒドロシリル化が Chalk-Harrod 機構で進行するという初めての報告となる。

(7) ロジウム触媒によるオレフィンとケトンのヒドロシリル化反応経路¹⁷

オレフィンやケトンのヒドロシリル化反応について、ロジウム触媒を用いた場合の反応経路の研究を行った。基質として、エチレンとアセトンのヒドロシリル化について、DFT法による計算を行い、これまで提唱されてきた Chalk-Harrod 機構や modified Chalk-Harrod 機構に加え、新たな反応経路として、alternative Chalk-Harrod 機構と double hydride(DH)機構を見出し、従来提唱されてきた機構との関連性について研究を行った。特に、DH 機構においてロジウム上にある複数のヒドリの効果によって、活性化エネルギーが低下するメカニズムがあることを見出した。

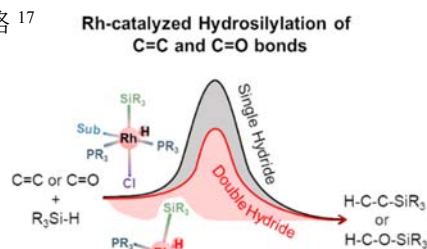


Figure 8. DH vs single hydride mechanism for hydrosilylation reaction of olefins and ketones. R catalyst with two hydrides is very active in C=C/C=O insertion into Rh-H bond.

(8) Ni 触媒による分子内環化によるベンゾフラン環の合成に関する研究¹⁹

遷移金属を用いた C-O 結合の活性化が近年盛んに研究されている。大阪大学・有澤研究室と共同で、Ni 触媒による分子内環化によるベンゾフラン環合成の反応機構について研究を行った。密度汎関数法による計算を行ない、中間体の熱力学的安定性を評価した。Niへの酸化的付加に伴って分子内環化が進行し、五員環中間体が形成され、複素間の構造再編により Ni を含む六員環が生成する。さらに、この中間体から還元的脱離によって C-O 結合が生成することで、ベンゾフラン環が生成するに至るという反応経路が見出された。遷移金属を含む複数の環状化合物が中間体として経路することが確認できれば、反応条件の制御により多様な分子変換が可能であり、期待が持たれる結果が得られた。より詳細なポテンシャル面の計算を行っており、反応機構に関する研究を継続している。

5. 参考文献

- (1) Watanabe, K.; Nakatani, N.; Nakayama, A.; Higashi, M.; Hasegawa, J. *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 8082.
- (2) Kitagawa, Y.; Chen, Y.; Nakatani, N.; Nakayama, A.; Hasegawa, J. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 18137.
- (3) Arulmozhiraja, S.; Nakatani, N.; Nakayama, A.; Hasegawa, J. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 23468.
- (4) Zhao, L.; Nakatani, N.; Nakayama, A.; Higashi, M.; Xu, X.; Hasegawa, J. to be submitted.
- (5) Harada, I.; Nakayama, A.; Hasegawa, J. *J. Comput. Chem.* **2019**, *40*, 507-514.
- (6) Oohora, K.; Meichin, H.; Zhao, L.; Wolf, M.; Nakayama, A.; Hasegawa, J.; Lehnert, N.; Hayashi, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 17265.
- (7) Ema, T.; Miyazaki, Y.; Shimonishi, J.; Maeda, C.; Hasegawa, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 15270.
- (8) Maeda, C.; Shimonishi, J.; Miyazaki, R.; Hasegawa, J.; Ema, T., *Chemistry, Eur. J.* **2016**, *22*, 6556.
- (9) Ema, T.; Miyazaki, Y.; Koyama, S.; Yano, Y.; Sakai, T. *Chem. Comm.* **2012**, *48*, 4489.
- (10) Hasegawa, J.; Miyazaki, R.; Maeda, C.; Ema, T. *Chem. Rec.* **2016**, *16*, 2260.
- (11) Ema, T.; Fukuhara, K.; Sakai, T.; Ohbo, M.; Bai, F.-Q.; Hasegawa, J. *Catal. Sci. Technol.* **2015**, *5*, 2314.
- (12) Deng, J.; Ratanasak, M.; Sako, Y.; Tokuda, H.; Maeda, C.; Hasegawa, J.; Nozaki, K.; Ema, T. *Chem. Sci.* in press.
- (13) Miyazaki, R.; Yoshii, D.; Jin, X.; Yatabe, R.; Mizuno, N.; Yamaguchi, K.; Hasegawa, J. to be submitted.
- (14) Yoshii, D.; Jin, X.; Yatabe, R.; Hasegawa, J.; Yamaguchi, K.; Mizuno, N. *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 14314-14317.
- (15) Miyazaki, R.; Nakatani, N.; Levchenko, S. V.; Yokoya, T.; Nakajima, K.; Hara, K.; Fukuoka, A.; Hasegawa, J. *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 12706-12715.
- (16) Nakatani, N.; Hasegawa, J.; Sunada, Y.; Nagashima, H. *Dalton Trans.*, **2015**, *44*, 19344.
- (17) Zhao, L.; Nakatani, N.; Sunada, Y.; Nagashima, H.; Hasegawa, J. *J. Org. Chem.* **2019**, *84*, 8552-8561.
- (18) Tanaka, S.; Nakashima, T.; Maeda, T.; Ratanasak, M.; Hasegawa, J.; Kon, Y.; Tamura, M.; Sato, K. *ACS Catal.* **2018**, *8*, 1097.
- (19) Ohno, S.; Qiu, J.; Miyazaki, R.; Aoyama, H.; Murai, K.; Hasegawa, J.; Arisawa, M. *Org. Lett.* **2019**, *21*, 8400-8403.
- (20) Ohtsuka, Y.; Nishikawa, Y.; Ogihara, H.; Yamanaka, I.; Ratanasak, M.; Nakayama, A.; Hasegawa, J. *J. Phys. Chem. A* **2019**, *123*, 8907-8912.
- (21) Chen, Y.; Hasegawa, J.; Yamaguchi, K.; Sakaki, S. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19*, 14947.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計46件（うち査読付論文 46件 / うち国際共著 12件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 J. Deng, M. Ratanasak, Y. Sako, H. Tokuda, C. Maeda, J. Hasegawa, K. Nozaki, T. Ema	4. 巻 11
2. 論文標題 Aluminum porphyrins with quaternary ammonium halides as catalysts for copolymerization of cyclohexene oxide and CO ₂ : Metal-ligand cooperative catalysis	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chem. Sci.	6. 最初と最後の頁 5669 ~ 5675
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0SC01609H	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 Murata Takumi, Hiyoshi Mahoko, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Ema Tadashi	4. 巻 56
2. 論文標題 Synthesis of silyl formates, formamides, and aldehydes via solvent-free organocatalytic hydrosilylation of CO ₂	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 5783 ~ 5786
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CC01371D	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 Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Parasuk Vudhichai	4. 巻 12
2. 論文標題 Roles of Salicylate Donors in Enhancement of Productivity and Isotacticity of Ziegler-Natta Catalyzed Propylene Polymerization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Polymers	6. 最初と最後の頁 883 ~ 883
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/polym12040883	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 Saito Kohei, Watabe Yuya, Fujihara Takashi, Takayanagi Toshiyuki, Hasegawa Jun ya	4. 巻 41
2. 論文標題 Spin inversion mechanisms in O ₂ binding to a model heme complex revisited by density function theory calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1130 ~ 1138
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26159	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 Ostojic B.D., Schwerdtfeger P., Nakayama A., Hasegawa J., Drovevic D.S.	4. 巻 206
2. 論文標題 A detailed analysis of the spin-crossover reaction of H ₂ S binding to heme and the six-coordinated FeP(Im)-HS porphyrin complex	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Inorganic Biochemistry	6. 最初と最後の頁 111049 ~ 111049
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jinorgbio.2020.111049	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 Han Lupeng, Cai Sixiang, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Wang Penglu, Zhang Jianping, Shi Liyi, Zhang Dengsong	4. 巻 119
2. 論文標題 Selective Catalytic Reduction of NO _x with NH ₃ by Using Novel Catalysts: State of the Art and Future Prospects	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Reviews	6. 最初と最後の頁 10916 ~ 10976
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemrev.9b00202	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 Qi Qi, Deng Yaqian, Gu Sichen, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Zhou Guangmin, Lv Xiaohui, Lv Wei, Yang Quan-Hong	4. 巻 11
2. 論文標題 l-Cysteine-Modified Acacia Gum as a Multifunctional Binder for Lithium-Sulfur Batteries	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 47956 ~ 47962
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.9b17458	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 Ding Shipeng, Guo Yalin, Hulsey Max J., Zhang Bin, Asakura Hiroyuki, Liu Lingmei, Han Yu, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Qiao Botao, Zhang Tao, Yan Ning	4. 巻 5
2. 論文標題 Electrostatic Stabilization of Single-Atom Catalysts by Ionic Liquids	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chem	6. 最初と最後の頁 3207 ~ 3219
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chempr.2019.10.007	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 Nakai Satoru, Yatabe Takafumi, Suzuki Kosuke, Sasano Yusuke, Iwabuchi Yoshiharu, Hasegawa Jun ya, Mizuno Noritaka, Yamaguchi Kazuya	4. 巻 58
2. 論文標題 Methyl Selective Oxygenation of Tertiary Amines to Formamides by Employing Copper/Moderately Hindered Nitroxyl Radical (DMN AZADO or 1 Me AZADO)	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 16651 ~ 16659
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201909005	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 Ohno Shohei, Qiu Jiawei, Miyazaki Ray, Aoyama Hiroshi, Murai Kenichi, Hasegawa Jun-ya, Arisawa Mitsuhiro	4. 巻 21
2. 論文標題 Ni-Catalyzed Cycloisomerization between 3-Phenoxy Acrylic Acid Derivatives and Alkynes via Intramolecular Cleavage and Formation of the C-O Bond To Give 2,3-Disubstituted Benzofurans	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 8400 ~ 8403
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.9b03170	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 Ohtsuka Yuhki, Nishikawa Yuta, Ogihara Hitoshi, Yamanaka Ichiro, Ratanasak Manussada, Nakayama Akira, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 123
2. 論文標題 Theoretical Study on the C-H Activation of Methane by Liquid Metal Indium: Catalytic Activity of Small Indium Clusters	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 8907 ~ 8912
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b06374	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 Koizumi Yu, Jin Xiongjie, Yatabe Takafumi, Miyazaki Ray, Hasegawa Jun ya, Nozaki Kyoko, Mizuno Noritaka, Yamaguchi Kazuya	4. 巻 58
2. 論文標題 Selective Synthesis of Primary Anilines from NH ₃ and Cyclohexanones by Utilizing Preferential Adsorption of Styrene on the Pd Nanoparticle Surface	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 10893 ~ 10897
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201903841	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 Zhao Liming, Nakatani Naoki, Sunada Yusuke, Nagashima Hideo, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 84
2. 論文標題 Theoretical Study on the Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds with Tertiary Silane	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 8552 ~ 8561
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.9b00959	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 Maeno Zen, Yasumura Shunsaku, Liu Chong, Toyao Takashi, Kon Kenichi, Nakayama Akira, Hasegawa Jun-ya, Shimizu Ken-ichi	4. 巻 21
2. 論文標題 Experimental and theoretical study of multinuclear indium-oxo clusters in CHA zeolite for CH ₄ activation at room temperature	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 13415 ~ 13427
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP01873E	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 De Chavez Danjo P., Gao Min, Kobayashi Hirokazu, Fukuoka Atsushi, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 475
2. 論文標題 Adsorption mediated tandem acid catalyzed cellulose hydrolysis by ortho-substituted benzoic acids	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecular Catalysis	6. 最初と最後の頁 110459 ~ 110459
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mcat.2019.110459	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 Han Lupeng, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Li Shuangxi, Shen Yongjie, Li Hongrui, Shi Liyi, Zhang Dengsong	4. 巻 53
2. 論文標題 SO ₂ -Tolerant Selective Catalytic Reduction of NO _x over Meso-TiO ₂ @Fe ₂ O ₃ @Al ₂ O ₃ Metal-Based Monolith Catalysts	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Environmental Science & Technology	6. 最初と最後の頁 6462 ~ 6473
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.est.9b00435	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 Miyazaki Ray, Nakatani Naoki, Levchenko Sergey V., Yokoya Takuro, Nakajima Kiyotaka, Hara Kenji, Fukuoka Atsushi, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 123
2. 論文標題 DFT Mechanistic Study on the Complete Oxidation of Ethylene by the Silica-Supported Pt Catalyst: C-C Activation via the Ethylene Dioxide Intermediate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 12706-12715
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b00158	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 I. Harada, A. Nakayama, J. Hasegawa	4. 巻 40
2. 論文標題 Constraint structure optimization to a specific minimum using ionization energy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem.	6. 最初と最後の頁 507-514
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25738	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 K. Yanai, K. Ishimura, A. Nakayama, J. Hasegawa	4. 巻 14
2. 論文標題 A First-Order Interacting Space Approach to Excited-State Molecular Interaction: Solvatochromic Shift of p-Coumaric Acid and Retinal Schiff Base	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Chem. Theory Comput.	6. 最初と最後の頁 3643-3655
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.7b01089	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 K. Kataoka, K. Wachi, X. Jin, K. Suzuki, Y. Sasano, Y. Iwabuchi, J. Hasegawa, N. Mizuno and K. Yamaguchi	4. 巻 9
2. 論文標題 CuCl/TMEDA/nor-AZADO-catalyzed aerobic oxidative acylation of amides with alcohols to produce imides	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem. Sci.	6. 最初と最後の頁 4756-4768
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8SC01410H	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. Tanaka, T. Nakashima, T. Maeda, M. Ratanasak, J. Hasegawa, Y. Kon, M. Tamura, and K. Sato	4. 巻 8
2. 論文標題 Quaternary Alkyl Ammonium Salt-Catalyzed Transformation of Glycidol to Glycidyl Esters by Transesterification of Methyl Esters	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Catal.	6. 最初と最後の頁 1097-1103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.7b03303	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 N. Nakatani, A. Nakayama, and J. Hasegawa	4. 巻 -
2. 論文標題 Transition States of Spin-State Crossing Reactions from Organometallics to Biomolecular Excited States	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Frontiers of Quantum Chemistry	6. 最初と最後の頁 289-314
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 Tanaka Shinji, Nakashima Takuya, Maeda Toshie, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Kon Yoshihiro, Tamura Masanori, Sato Kazuhiko	4. 巻 8
2. 論文標題 Quaternary Alkyl Ammonium Salt-Catalyzed Transformation of Glycidol to Glycidyl Esters by Transesterification of Methyl Esters	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 1097 ~ 1103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.7b03303	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 Oohora Koji, Meichin Hiroyuki, Zhao Liming, Wolf Matthew W., Nakayama Akira, Hasegawa Jun-ya, Lehnert Nicolai, Hayashi Takashi	4. 巻 139
2. 論文標題 Catalytic Cyclopropanation by Myoglobin Reconstituted with Iron Porphycene: Acceleration of Catalysis due to Rapid Formation of the Carbene Species	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 17265 ~ 17268
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b10154	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 Kimura Akihiro, Hayama Haruka, Hasegawa Jun-ya, Nageh Hassan, Wang Yue, Naga Naofumi, Nishida Mayumi, Nakano Tamaki	4. 巻 8
2. 論文標題 Recyclable and efficient polyurethane-Ir catalysts for direct borylation of aromatic compounds	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Polymer Chemistry	6. 最初と最後の頁 7406 ~ 7415
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7PY01509G	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 Tamura Masazumi, Kishi Ryota, Nakayama Akira, Nakagawa Yoshinao, Hasegawa Jun-ya, Tomishige Keiichi	4. 巻 139
2. 論文標題 Formation of a New, Strongly Basic Nitrogen Anion by Metal Oxide Modification	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 11857 ~ 11867
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b05227	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 Nageh Hassan, Zhao Liming, Nakayama Akira, Hasegawa Jun-ya, Wang Yue, Nakano Tamaki	4. 巻 53
2. 論文標題 Photo-induced β -elimination of 9-fluorenylmethanol leading to dibenzofulvene	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 8431 ~ 8434
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CC03297H	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 Ohtsuka Yuhki, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 147
2. 論文標題 Selected configuration interaction method using sampled first-order corrections to wave functions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 034102 ~ 034102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4993214	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 Yokoyama Haruka, Kobayashi Hirokazu, Hasegawa Jun-ya, Fukuoka Atsushi	4. 巻 7
2. 論文標題 Selective Dehydration of Mannitol to Isomannide over H Zeolite	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 4828 ~ 4834
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.7b01295	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 Kovalskii V., Shubin A., Chen Y., Ovchinnikov D., Ruzankin S.Ph., Hasegawa J., Zilberberg I., Parmon V.N.	4. 巻 679
2. 論文標題 Hidden radical reactivity of the [FeO] ₂ ⁺ group in the H-abstraction from methane: DFT and CASPT2 supported mechanism by the example of model iron (hydro)oxide species	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 193 ~ 199
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2017.05.002	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 Chen Yue, Hasegawa Jun-ya, Yamaguchi Kazuya, Sakaki Shigeyoshi	4. 巻 19
2. 論文標題 A coordination strategy to realize a sextuply-bonded complex	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 14947 ~ 14954
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CP00871F	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 K. Yanai, K. Ishimura, A. Nakayama, M. W. Schmidt, M. S. Gordon, and J. Hasegawa	4. 巻 120
2. 論文標題 Electronic Polarization Effect of the Water Environment in Charge-Separated Donor-Acceptor Systems: An Effective Fragment Potential Model Study	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 10273-10280
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.6b10552	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 D. Yoshii, X. Jin, T. Yatabe, J. Hasegawa, K. Yamaguchi, and N. Mizuno	4. 巻 52
2. 論文標題 Gold nanoparticles on OMS-2 for heterogeneously catalyzed aerobic oxidative , - dehydrogenation of b-heteroatom-substituted ketones	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Chem. Comm.	6. 最初と最後の頁 14314-14317
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c6cc07846j	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 K. Watanabe, N. Nakatani, A. Nakayama, M. Higashi, and J. Hasegawa	4. 巻 55
2. 論文標題 Spin-Blocking Effect in CO and H2 Binding Reactions to Molybdenocene and Tungstenocene: A Theoretical Study on the Reaction Mechanism via the Minimum Energy Intersystem Crossing Point	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Inorg. Chem.	6. 最初と最後の頁 8082-8090
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.6b01187	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 Y. Kitagawa, Y. Chen, N. Nakatani, A. Nakayama, and J. Hasegawa	4. 巻 18
2. 論文標題 A DFT and multi-configurational perturbation theory study on O2 binding to a model heme compound via the spin-change barrier	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 18137-18144
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C6CP02329K	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 J. Hasegawa, R. Miyazaki, C. Maeda, and T. Ema	4. 巻 16
2. 論文標題 Theoretical Study on Highly Active Bifunctional Metalloporphyrin Catalysts for the Coupling Reaction of Epoxides with Carbon Dioxide	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Chem. Rec.	6. 最初と最後の頁 2260-2267
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/tcr.201600053	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 Maeda Chihiro, Shimonishi Junta, Miyazaki Ray, Hasegawa Jun-ya, Ema Tadashi	4. 巻 22
2. 論文標題 Highly Active and Robust Metalloporphyrin Catalysts for the Synthesis of Cyclic Carbonates from a Broad Range of Epoxides and Carbon Dioxide	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 6556 ~ 6563
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201600164	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 N. Kamimoto, N. Nakamura, A. Tsutsumi, H. Mandai, K. Mistudo, A. Wakamiya, Y. Murata, J. Hasegawa, and S. Suga	4. 巻 5
2. 論文標題 Facile Synthesis of 1,4-Bis(diaryl)-1,3-butadiynes Bearing Two Amino Moieties by Electrochemical Reaction Site Switching, and Their Solvatochromic Fluorescence	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Asian J. Org. Chem.	6. 最初と最後の頁 373-379
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1002/ajoc.201500502	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 Arulmozhiraja Sundaram, Coote Michelle L., Hasegawa Jun-ya	4. 巻 143
2. 論文標題 Electronic spectra of azaindole and its excited state mixing: A symmetry-adapted cluster configuration interaction study	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 204304 ~ 204304
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4935578	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 Kobayashi Hirokazu, Yabushita Mizuho, Hasegawa Jun-ya, Fukuoka Atsushi	4. 巻 119
2. 論文標題 Synergy of Vicinal Oxygenated Groups of Catalysts for Hydrolysis of Cellulosic Molecules	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 20993 ~ 20999
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.5b06476	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 Arulmozhiraja Sundaram, Nakatani Naoki, Nakayama Akira, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 17
2. 論文標題 Energy dissipative photoprotective mechanism of carotenoid spheroidene from the photoreaction center of purple bacteria Rhodobacter sphaeroides	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 23468 ~ 23480
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C5CP03089G	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 Nishizawa Shohei, Hasegawa Jun-ya, Matsuda Kenji	4. 巻 119
2. 論文標題 Computational Investigation into Photoswitching Efficiency of Diarylethene Derivatives: An Insight Based on the Decay Constant of Electron Tunneling	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 20169 ~ 20178
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.5b06738	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 Ema Tadashi, Fukuhara Kazuki, Sakai Takashi, Ohbo Masaki, Bai Fu-Quan, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 5
2. 論文標題 Quaternary ammonium hydroxide as a metal-free and halogen-free catalyst for the synthesis of cyclic carbonates from epoxides and carbon dioxide	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Catalysis Science & Technology	6. 最初と最後の頁 2314 ~ 2321
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C5CY00020C	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 Oohora Koji, Ogawa Ayumu, Fukuda Tamaki, Onoda Akira, Hasegawa Jun-ya, Hayashi Takashi	4. 巻 54
2. 論文標題 meso-Dibenzoporphycene has a Large Bathochromic Shift and a Porphycene Framework with an Unusual cis-Tautomeric Form	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 6227 ~ 6230
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201501496	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 Naoki Nakatani, Jun-ya Hasegawa, Yusuke Sunada, Hideo Nagashima	4. 巻 44
2. 論文標題 Platinum-catalyzed reduction of amides with hydrosilanes bearing dual Si-H groups: a theoretical study of the reaction mechanism	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Dalton Trans.	6. 最初と最後の頁 19344-19356
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI:10.1039/C5DT02767E	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 Nishizawa Shohei, Hasegawa Jun-ya, Matsuda Kenji	4. 巻 119
2. 論文標題 Theoretical Investigation on the Decaying Behavior of Exchange Interaction in Quinoid and Aromatic Molecular Wires	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 5117 ~ 5121
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jp511608w	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23件 (うち招待講演 20件 / うち国際学会 21件)

1. 発表者名 長谷川淳也
2. 発表標題 開殻電子系が関与する反応の理論化学：系間交差のポテンシャル面
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会 中長期企画講演「開殻性分子種：ファジーボンドが拓く新たな化学」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, and J. Hasegawa
2. 発表標題 Exploring the Enantioselective Mechanism of Pd Catalyst with Polyquinoxaline Ligand for Asymmetric Hydrosilylation of Styrene
3. 学会等名 2018 National Symposium for Molecular Chirality (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Computational Chemistry with Constraint Force
3. 学会等名 A Satellite Symposium to celebrate Prof. Kenichi Fukui 's 100th birthday (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Ohtsuka, Y. Nishikawa, H. Ogihara, I. Yamanaka, and J. Hasegawa
2. 発表標題 Methane to Ethane Conversion by Liquid Metal Indium: A DFT Mechanistic Study
3. 学会等名 2018 International Symposium on Advancement and Prospect of Catalysis Science & Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Reaction Mechanisms Involving Intersystem Crossing” Pure and Applied Chemistry International Conference 2018 (PACCON 2018)
3. 学会等名 Pure and Applied Chemistry International Conference 2018 (PACCON 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Reaction Mechanisms Involving Intersystem Crossing
3. 学会等名 Pure and Applied Chemistry International Conference 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Constraint Structure Optimization for Minimum Energy Intersystem Crossing Point
3. 学会等名 The 8-th Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Constraint Structure Optimization for Minimum Energy Intersystem Crossing Point
3. 学会等名 The XXII-th Quantum Systems in Chemistry, Physics, and Biology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Constraint Structure Optimization for Minimum Energy Intersystem Crossing Point
3. 学会等名 Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 J. Hasegawa, M. Ohbo, Y. Hoshimoto, and S. Ogoshi
2. 発表標題 Theoretical Study of Frustrated Lewis Pair for Activation of Stable Chemical Bonds
3. 学会等名 The 21th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 21) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Excited-State Molecular Interactions: a First-Order Interacting Space Approach
3. 学会等名 3rd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Constraint Structure Optimization for a Particular Energy Minimum
3. 学会等名 2017 Summer Symposium of KCS-Physical Chemistry Division and 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 J. Hasegawa, K. Yanai, K. Ishimura
2. 発表標題 Excited-State Molecular Interactions: a First-Order Interacting Space Approach
3. 学会等名 International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 M. Ratanasak, M. Suginome, and J. Hasegawa
2. 発表標題 Exploring the Enantioselective Mechanism of Chiral Materials Based Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s for Asymmetric Hydrosilylation of Styrene
3. 学会等名 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 L. Zhao, N. Nakatani, Y. Sunada, H. Nagashima, J. Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Rh-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds
3. 学会等名 IRCCS-JST CREST Joint Symposium, Kyushu University (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 L. Zhao, N. Nakatani, Y. Sunada, H. Nagashima, J. Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Rhodium-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds
3. 学会等名 Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Ray Miyazaki, Naoki Nakatani, Takuro Yokoya, Kiyotaka Nakajima, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanism of ethylene oxidation by Pt catalyst supported on mesoporous silica: a theoretical study
3. 学会等名 第7回量子化学スクール～基礎理論と高精度理論の発展～
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 M. Ratanasak, M. Suginome, and J. Hasegawa
2. 発表標題 Exploring the Enantioselective Mechanism of Chiral Materials Based Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s for Asymmetric Hydrosilylation of Styrene
3. 学会等名 The 21th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Constraint Structure Optimization on Potential Energy Surface
3. 学会等名 Thai-Japan Symposium in Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Transition states of spin-crossing reactions
3. 学会等名 EMN Meeting on Computation and Theory (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Transition states of spin-crossing reactions
3. 学会等名 International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016 "Recent Advances in Pure & Applied Chemistry", (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 CO ₂ fixation mechanism of bifunctional porphyrin catalyst: a theoretical study
3. 学会等名 Pacifichem2015 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical Study of CO ₂ Fixation by a Bifunctional Porphyrin Catalyst
3. 学会等名 ICIQ-FIFC Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Comple Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2015年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>触媒科学研究所触媒理論研究部門HP http://theory.cat.hokudai.ac.jp/ Catalysis Theory Research Division http://theory.cat.hokudai.ac.jp/ 触媒理論研究部門ホームページ http://theory.cat.hokudai.ac.jp/</p>

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
研究協力者	中山 哲 (Nakayama Akira)	東京大学・大学院工学系研究院・教授 (12601)	
研究協力者	中谷 直輝 (Nakatani Naoki)	東京都立大学・理工学研究院・准教授 (22604)	
研究協力者	高 敏 (Gao Min)	北海道大学・触媒科学研究所・助教 (10101)	