

令和 5 年 6 月 6 日現在

機関番号：15401

研究種目：学術変革領域研究(B)

研究期間：2020～2022

課題番号：20H05739

研究課題名(和文)重水素科学のための基礎理論の構築と新概念の創出

研究課題名(英文)Construction of basic theory for deuterium science and creation of new concept

研究代表者

石元 孝佳(Ishimoto, Takayoshi)

広島大学・先進理工系科学研究科(工)・教授

研究者番号：50543435

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 24,200,000円

研究成果の概要(和文)：重水素化合物の安定性・反応性の制御や薬理活性の本質的な理解のためには、デューテロンの量子性が重水素化合物の電子状態に与える影響を正しく理解することが必要である。本申請では、重水素化合物の物性や反応性に関する本当の姿を明らかにするために、重水素化合物に対して、Born-Oppenheimer (BO)近似を用いない新規量子論の構築に取り組み、励起状態や化学シフトで水素・重水素の違いを記述できるような方法論の開発・改良した。さらに、重水素化合物の電子状態や物性、KIEの解析、反応溶媒(D2Oなど)・酵素との安定性、反応性に関する解析した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

2017年の重水素化医薬品の登場に伴い、重水素化合物の研究開発が激化している。しかしながら、重水素化に伴う、化学結合の強化や速度論的同位体効果、種々の物性変化がどのような機構で引き起こされるのか、その詳細は十分に明らかにされていない。本研究ではこれらの課題解決に向けて、従来の量子化学計算手法とは異なる non-BO型の計算手法を開発した。開発手法により重水素化合物の本質を捉えることが可能となったことで、今後の重水素化合物の研究開発にも多いに応用でき、研究の効率化や新材料の開拓などに貢献できることが期待である。

研究成果の概要(英文)：To understand the mechanism of stability and reactivity of deuterated compounds, it is necessary to understand the electronic structure changes of deuterated compounds induced by the quantum effect of deuteron. In this study, we developed the new quantum theory, which is non-Born-Oppenheimer type approach, for the deuterated compounds to solve the real behavior of deuterated compounds about their properties and reactivities. Especially, we succeeded the calculations of excited states and some spectroscopic properties to describe the difference of hydrogen and deuterium. In addition, we analyzed the electronic structure, kinetic isotope effect, stability and reactivity in enzyme for deuterated compounds, and found the role of deuterium effect for those.

研究分野：計算科学

キーワード：重水素 理論化学 量子効果

1. 研究開始当初の背景

現在の量子化学計算は、“電子”の量子力学的振る舞いを記述するために、Born-Oppenheimer(BO)近似を適用した Schrödinger 方程式を支配方程式とする。ここで BO 近似とは分子の物性・反応性は電子の波動関数で記述可能という立場から、『分子中の電子と原子核の運動を分離して電子の Schrödinger 方程式を解く』という考え方である。この“電子状態”計算の下で、エネルギーや振動スペクトルにおける水素/重水素(H/D)の違いは、主に H/D の質量差に起因するため、“電子状態”計算の枠組みでも定性的な解析が可能である。

一方、有機反応や生体内の酵素反応で見られる大きな速度論的同位体効果(KIE) (*J. Am. Chem. Soc.*, **124**, 3865 (2002))は“電子状態”計算の枠組みにプロトンとデューテロンのトンネル効果の補正項を加えることで議論される。しかしながら、酵素内で見られる 100 に近い KIE を“補正”によって議論することは現実を見誤っている可能性が極めて高い。さらに最も身近で単純な水(H₂O/D₂O)に着目すると、X線/中性子線回折 (*Phys. Rev. Lett.*, **101**, 065502 (2008))などにより、D₂O の水素結合長は H₂O よりも長く(幾何学的同位体効果(GIE))、D₂O は H₂O よりも弱い水素結合を形成することを示唆している。また、イオン化エネルギーや双極子モーメントといった電子物性が H₂O と D₂O では大きく異なっている。このような水素結合構造で見られる GIE や電子物性の違いを“電子”のみに着目した現在の量子化学計算で解明することは極めて困難である。なぜなら BO 近似の下、電子と原子

核の運動(量子力学的振る舞い)に関するカップリング項を完全に無視しているため、プロトン・デューテロンの量子力学的振る舞いの違いが電子状態へ及ぼす影響を記述することは理論的に出来ないからである。

表1 H₂OとD₂Oの基礎物性の比較

	H ₂ O	D ₂ O	H ₂ ¹⁸ O
分子量	18	20	20
融点(°C)	0.00	3.82	0.28
沸点(°C)	100.0	101.4	100.2
密度(g/cm ³)	1.000	1.105	1.112
イオン化エネルギー(eV)	12.61	12.64	
双極子モーメント(D)	1.85	1.87	

水同位体の熱力学的物性変化は単純な質量差では説明不可!
水素結合距離の伸長(O...O(H) < O...O(D))
H/D周辺の電子状態・電荷分布の変化

2. 研究の目的

本申請では、重水素化合物の物性や反応性に関する本当の姿を明らかにするために、重水素化合物に対して、BO 近似を用いない、つまり non-BO 型の新規量子論の構築に取り組む。さらに、重水素化合物の電子状態や物性、KIE の解析、反応溶媒(D₂O など)・酵素との安定性、反応性について解析する。

3. 研究の方法

A. 重水素化合物のための non-BO 型量子化学計算手法の構築

重水素化合物中に含まれるデューテロンの量子効果が電子状態に与える影響を露に考慮するために、本申請では BO 近似を用いず Schrödinger 方程式を解く non-BO 型量子化学計算手法を開発する。すでに申請者は non-BO 量子論の開発実績があり(論文リスト 1 他多数)プログラム開発と実装を強力に推進することが可能である。KIE の解析に必要な遷移状態計算には Nudged Elastic Band (NEB)法を使用することで、デューテロンの量子効果を露わに考慮した形で遷移状態探索を行うことが可能となる。また、溶媒や酵素などの周辺環境の影響を計算モデルに反映させるために、分子力場と組み合わせた QM/MM 法へ展開する。研究代表者は計算手法の全体の設計と汎用性の拡張を担当する。NEB 法の実装については研究分担者の宇田川助教が、溶媒や

酵素と重水素化物質の相互作用構造部分の QM/MM 法の開発については、研究分担者の兼松研究員が担当する

B. 重水素化物質に対する新概念の創出に向けた解析

2017 年に重水素医薬品が承認され臨床試験が開始されたが、重水素医薬品の作用機構については不明な点が多く憶測の域を脱していない。つまり、重水素化物質の安定性・反応性の制御や薬理活性の本質的な理解には、重水素化物質の電子状態を正しく理解することが必要である。そこで本申請では、実験グループの合成した重水素化物質を対象とし、結合強度や O 脱メチル、N 脱メチルの解離エネルギーについて水素置換体との比較から明らかにする。また、基質の活性部位の一つであるメチル基の部分重水素置換効果の解析、酵素反応における大きな KIE 出現機構については研究分担者と密に連携をとりながら研究を進め、デューテロンの量子効果が電子状態や安定性、反応性に与える影響を明らかにすることで、重水素の本質を抽出する。

4. 研究成果

A. 重水素化物質のための non-BO 型量子化学計算手法の構築

本研究期間で、これまで我々が開発してきた non-BO 量子論を汎用プログラムの一つである Gaussian16 をベースに開発・実装に取り組んできた。プロトンやデューテロンといった量子的に取り扱う原子核の基底関数を一つのガウス型関数で記述した場合、Gaussian16 の多くのアルゴリズムを活用して non-BO 型の計算が可能であることを見出した。その結果、従来は non-BO 型の Hartree-Fock 法をベースに理論を構築し、プログラムを実装する必要があったため、膨大な開発コストがかかっていたが、比較的にプログラムを拡張を行えるようになった。例えば、Gaussian16 で実行可能な、MP2 や CCSD(T)などの Post-HF 法に加え、ほぼ全ての汎関数にも対応することが出来、DFT 計算も non-BO 量子論として使用できる状況を整えた。また、溶媒効果の取り込みや、自由エネルギーの算出など、各種物理量の評価においても原子核の量子効果を露わに取り込んだ計算が可能になった。加えて、速度論的同位体効果の解析に重要となる遷移状態探索手法についても開発および実装に取り組んだ。二次微分を必要としない NEB 法の実装の他、Gaussian16 の遷移状態探索アルゴリズムを活用した計算も可能とした。本研究におけるたんぱく質内での化学反応解析を可能とするために、Gaussian16 に実装されている ONIOM 法への拡張にも取り組んだ。QM/MM の取り扱いの他、構造最適化、振動解析など計算可能であることを確認した。

B. 重水素化物質に対する新概念の創出に向けた解析

2017 年に重水素医薬品が承認され臨床試験が開始されたが、重水素医薬品の作用機構については不明な点が多く憶測の域を脱していない。つまり、重水素化物質の安定性・反応性の制御や薬理活性の本質的な理解には、重水素化物質の電子状態を正しく理解することが必要である。そこで本研究では、重水素医薬品のモデル化合物における水素・重水素引き抜き反応の H/D 同位体効果を解析した。モデル化合物には代表的な重水素医薬品であるデューテトラベナジンの部分構造を模したアニソールを使用した。 $-\text{CH}_3/\text{CH}_2\text{D}/\text{CHD}_2/\text{CD}_3$ の 4 種類のメチル構造を用意し、酸素ラジカル部分への水素・重水素移動における活性化エネルギーを算出し、速度論的同位体効果(KIE)を決定した。重水素の数が増えるに従い、移動する重水素の活性化障壁は高くなり、大きな KIE が得られた。この時、水素結合部分に関する幾何学的な同位体効果や水素・重水素周辺の電子状態変化も確認することが出来た。現在はより現実的な系に開発手法を適用し、生体内反応における重水素効果について解析を継続している。

計算手法の更なる発展として、重水素化物質の表面吸着における挙動を精密に記述できる計算手法の開発にも取り組んだ。ここでは、局所的な計算手法に本研究で開発した non-BO 量子論を

活用することで、表面吸着状態の解析を行った。重水素化合物の合成は不均一触媒を用いて行われるが、金属種により反応性が大きく異なる根本理由は未だ解明されていない。本研究では、その一例として、白金表面への重水の吸着について解析した。計算の結果、分子の場合同様に、構造や吸着エネルギーに重水素効果を確認することが出来た。今後は水の解離における重水素効果や様々な金属系での吸着・反応性の解析を進めていく予定である。

重水素化合物の物性解析に関しては、実験グループとの連携による解析も並行して進めた。実験グループの合成・評価した重水素化合物について開発手法を用いて電子状態や構造など種々の物理量の算出に取り組んだ。計算の結果、いずれの重水素化合物においても、ドューテロンの量子効果が骨格構造や電子状態に影響を与えることが確認できた。今後より多くの重水素化合物の物性データを蓄積していくことで、重水素効果の新たな概念を見出す可能性を確認することが出来た。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計14件（うち査読付論文 14件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Kimura Yuka, Kanematsu Yusuke, Sakagami Hiroki, Rivera Rocabado David S., Shimazaki Tomomi, Tachikawa Masanori, Ishimoto Takayoshi	4. 巻 126
2. 論文標題 Hydrogen/Deuterium Transfer from Anisole to Methoxy Radicals: A Theoretical Study of a Deuterium-Labeled Drug Model	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 155 ~ 163
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c08514	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 Udagawa Taro, Hattori Ikumi, Kanematsu Yusuke, Ishimoto Takayoshi, Tachikawa Masanori	4. 巻 122
2. 論文標題 Nuclear quantum effect and H/D isotope effect in excited state intramolecular proton transfer and electron induced intramolecular proton transfer reactions in 8 hydroxyquinoline	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Quantum Chemistry	6. 最初と最後の頁 e26962
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/qua.26962	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 Katori Toshiharu, Kunishige Sachi, Baba Masaaki, Nakayama Naofumi, Ishimoto Takayoshi, Nishiyama Akiko, Yamasaki Sho, Misono Masatoshi	4. 巻 157
2. 論文標題 Electronic, vibrational, and rotational analysis of 1,2-benzanthracene by high-resolution spectroscopy referenced to an optical frequency comb	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 234303 ~ 234303
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0129297	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 Imai Keisuke, Tomita Naohito, Fujioka Hiroyoshi, Kamiya Mako, Ogasahara Riku, Ban Kazuho, Shimizu Hyoga, Ishimoto Takayoshi, Sajiki Hironao, Akai Shuji, Sawama Yoshinari	4. 巻 12
2. 論文標題 Homemade Solution of NaOD in D2O: Applications in the Field of Stilbene d1 Synthesis	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Asian Journal of Organic 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/ajoc.202200690	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 Udagawa Taro, Tanaka Hikaru, Hirano Tsuneo, Kuwahata Kazuaki, Tachikawa Masanori, Baba Masaaki, Nagashima Umpei	4. 巻 127
2. 論文標題 Direct Elucidation of the Vibrationally Averaged Structure of Benzene: A Path Integral Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 894 ~ 901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c07197	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 Sawama Yoshinari, Kuwata Shoko, Mae Miyu, Udagawa Taro, Akai Shuji, Sajiki Hironao	4. 巻 58
2. 論文標題 Oxidative two-way regiocontrolled coupling of 3-methoxycarbonylcatechol and indoles to arylindoles	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 12935 ~ 12938
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CC04843D	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 Udagawa Taro, Kinoshita Amane, Kuwahata Kazuaki, Tachikawa Masanori	4. 巻 24
2. 論文標題 A path integral molecular dynamics study on the NH ₄ ⁺ rotation in NH ₄ ⁺ ...XH ₂ (X = Be or Mg) dihydrogen bond systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 17295 ~ 17302
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP01999J	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 Hikaru, Kuwahata Kazuaki, Tachikawa Masanori, Udagawa Taro	4. 巻 7
2. 論文標題 Low-Barrier Hydrogen Bond in Fujikurin A-D: A Computational Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 14244 ~ 14251
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c00857	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 Udagawa Taro, Kuwahata Kazuaki, Tachikawa Masanori	4. 巻 1208
2. 論文標題 Competitive nuclear quantum effect and H/D isotope effect on torsional motion of H ₂ O ₂ : An ab initio path integral molecular dynamics study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational and Theoretical Chemistry	6. 最初と最後の頁 113542 ~ 113542
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.comptc.2021.113542	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 Yodsin Nuttapon, Sakagami Hiroki, Udagawa Taro, Ishimoto Takayoshi, Jungsuttiwong Siriporn, Tachikawa Masanori	4. 巻 504
2. 論文標題 Metal-doped carbon nanocones as highly efficient catalysts for hydrogen storage: Nuclear quantum effect on hydrogen spillover mechanism	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Molecular Catalysis	6. 最初と最後の頁 111486 ~ 111486
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mcat.2021.111486	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 Sakagami Hiroki, Tachikawa Masanori, Ishimoto Takayoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 Theoretical study of the H/D isotope effect of CH ₄ /CD ₄ adsorption on a Rh(111) surface using a combined plane wave and localized basis sets method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 10253 ~ 10257
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0RA10796D	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 Ishimoto Takayoshi, Sakagami Hiroki, Kanematsu Yusuke, Tachikawa Masanori	4. 巻 561
2. 論文標題 H/D isotope effect between adsorbed water (H ₂ O, D ₂ O, and HDO) and H ₂ O- and D ₂ O-ice Ih(0001) basal surfaces based on the combined plane wave and localized basis set method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 150100 ~ 150100
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2021.150100	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 Sakagami Hiroki, Tachikawa Masanori, Ishimoto Takayoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 Theoretical study of the H/D isotope effect of CH ₄ /CD ₄ adsorption on a Rh(111) surface using a combined plane wave and localized basis sets method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 10253 ~ 10257
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0RA10796D	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 Yodsin Nuttapon, Sakagami Hiroki, Udagawa Taro, Ishimoto Takayoshi, Jungsuttiwong Siriporn, Tachikawa Masanori	4. 巻 504
2. 論文標題 Metal-doped carbon nanocones as highly efficient catalysts for hydrogen storage: Nuclear quantum effect on hydrogen spillover mechanism	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Molecular Catalysis	6. 最初と最後の頁 111486 ~ 111486
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mcat.2021.111486	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30件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 片岡 和樹、兼松 佑典、石元 孝佳
2. 発表標題 量子多成分系分子理論における赤外分光計算の条件検討
3. 学会等名 第22回大つくば物理化学セミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 見谷泰知、兼松佑典、石元孝佳
2. 発表標題 重水素医薬品の代謝におけるH/D速度論的同位体効果の発現機構に関する理論的解析
3. 学会等名 2022年日本化学会中国四国支部大会 広島大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 下畑佑也、兼松佑典、David S. Rivera Rocabado、石元孝佳
2. 発表標題 CPLB法による水の構造と物性に対する重水素効果の理論解析
3. 学会等名 2022年日本化学会中国四国支部大会 広島大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 坂上弘輝、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 金属表面への分子吸着における吸着構造とH/D動態効果の解析に向けたCPLB法の開発
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 見谷泰知、兼松佑典、石元孝佳
2. 発表標題 重水素医薬品におけるH/D速度論的同位体効果の発現機構に関する理論的解析
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 下畑佑也、兼松佑典、David S. Rivera Rocabado、石元孝佳
2. 発表標題 CPLB法による水の構造と物性に対する重水素効果の理論解析
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石元孝佳
2. 発表標題 気相・吸着分子のH/D同位体効果に関する精密量子化学計算
3. 学会等名 冷却分子・精密分光シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 那須一真、坂上弘輝、石元孝佳、島崎智実、立川仁典
2. 発表標題 白金表面における水の吸着・反応に関する重水素効果の理論解析
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 坂上弘輝、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 金属表面への分子吸着に対するH/D同位体効果の解析に向けたCPLB法の開発
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石元孝佳
2. 発表標題 重医薬品の設計に向けた理論計算-機能発現における起源は何か-
3. 学会等名 日本薬学会第143年会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 兼松佑典、下畑佑也、石元孝佳
2. 発表標題 三態の水に現れる水素原子核の量子効果
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石元孝佳
2. 発表標題 重水素化学のための新理論の構築と新概念の創出
3. 学会等名 第11回CSJ化学フェスタ（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 坂上弘輝、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 金属表面への分子吸着におけるH/D同位体効果の解析に向けたCPLB法の開発と応用
3. 学会等名 第15回分子科学討論会2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石元孝佳
2. 発表標題 平面波局在ハイブリッド計算手法の開発と応用
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 坂上弘輝、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 CPLB法の開発とRh(111)表面へのメタン吸着に対するH/D同位体効果の解析
3. 学会等名 第1回若手重水素研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 那須一真、坂上弘輝、立川仁典、島崎智実、石元孝佳
2. 発表標題 白金(111)上でのH ₂ O, HOD, D ₂ O吸着に関する理論解析
3. 学会等名 第1回若手重水素研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 服部郁美、兼松佑典、石元孝佳、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 励起状態分子内プロトン移動反応に対するH/D同位体効果の理論的解析
3. 学会等名 第1回若手重水素研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小林輝、高木牧人、桑畑和明、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 経路積分分子動力学法を用いた四角酸結晶における水素結合構造の理論的解析
3. 学会等名 第1回若手重水素研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 坂上弘輝、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 CPLB法の開発とRh(111)表面へのメタン吸着に対するH/D同位体効果の解析
3. 学会等名 第60回分子科学若手の会夏の学校
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 坂上弘輝、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 金属表面への分子吸着に対するH/D同位体効果の理論解析に向けたCPLB法の開発と応用
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 下畑佑也、兼松佑典、石元孝佳
2. 発表標題 CPLB法による水の構造と物性に対する重水素効果の理論解析
3. 学会等名 第21回大つくば物理化学セミナー
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 見谷泰知、兼松佑典、石元孝佳
2. 発表標題 重水素医薬品におけるH/D速度論的同位体効果の発現機構に関する理論的解析
3. 学会等名 第21回大つくば物理化学セミナー
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森山将吾、石元孝佳、茂木凱貴、佐治木弘尚、赤井周司、澤間善成
2. 発表標題 多重水素化トリフェニルホスフィンの合成ならびに機能評価
3. 学会等名 日本薬学会第142年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 那須一真、坂上弘輝、石元孝佳、島崎智実、立川仁典
2. 発表標題 白金表面における水の吸着・反応に関する重水素効果の理論解析
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 坂上弘輝、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 金属表面への分子吸着に対するH/D同位体効果の解析に向けたCPLB法の開発
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takayoshi Ishimoto
2. 発表標題 Electronic structure calculation of metal nanoparticles -Toward theoretical design of functionality and activity-
3. 学会等名 IAAM Advanced Materials Lecture (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 坂上弘輝、石元孝佳、立川仁典
2. 発表標題 金属表面へのCH ₄ /CD ₄ 吸着におけるH/D同位体効果の解析に向けたCPLB法の開発
3. 学会等名 第14回物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Takayoshi Ishimoto, Hiroki Sakagami, Masanori Tachikawa
2. 発表標題 H/D isotope effect of CH ₄ /CD ₄ adsorption on Rh(111) surface using combined plane wave and localized basis sets method
3. 学会等名 The 5th Asian Workshop on Molecular Spectroscopy (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宇田川太郎
2. 発表標題 重水素を取り扱うための量子化学計算手法の開発と応用計算
3. 学会等名 第1回Deut-Switchセミナー (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 兼松佑典
2. 発表標題 金属醇素の活性発現機構に関する多角的な理論解析
3. 学会等名 第2回Deut-Switch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
研究 分担者	兼松 佑典 (Yukuke Kanematsu) (10765936)	広島大学・先進理工系科学研究科(工)・助教 (15401)	
研究 分担者	宇田川 太郎 (Taro Udagawa) (70509356)	岐阜大学・工学部・助教 (13701)	

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