

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 3 年 6 月 22 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (特設分野研究)

研究期間：2016～2020

課題番号：16KT0165

研究課題名(和文)銅錯体における光励起ダイナミクスの反応機構及び制御法の解明

研究課題名(英文)Elucidation of reaction mechanism and control method of photoexcitation dynamics in copper complexes

研究代表者

東 雅大(Higashi, Masahiro)

京都大学・工学研究科・准教授

研究者番号：20611479

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、我々が独自に開発してきた分子動力学シミュレーションと量子化学計算を効率的に結びつける計算手法を応用し、ビスジイミン銅(I)錯体の光励起ダイナミクスの分子論的機構を解析した。非断熱分子動力学シミュレーションの結果から、周囲の溶媒分子が光励起ダイナミクスに大きな影響を与えることが分かった。また、ポテンシャルエネルギー面の解析から、一重項高励起状態は速やかに一重項励起状態に緩和することが示唆された。さらに、金(I)三量体錯体やHBT、TCNQなど様々な物質の光物性の理論解析も行い、特に溶媒が光物性に与える影響を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、特に環境の効果に着目し、周囲の溶媒が光励起ダイナミクスや吸収スペクトルなどの光物性に大きな影響を与えることを理論計算により明らかにした。これまで光物性の解析に置いて環境の効果はあまり着目されておらず、その重要性を示したことは学術的に大きな意義があったと考えられる。今後、本研究で得られた成果が、光エネルギーの有効利用の手がかりとなり、光触媒や太陽電池などの分子設計の指針となることも期待される。

研究成果の概要(英文)：In this study, we have applied our original computational method that efficiently combines molecular dynamics simulation and quantum chemical calculation to analyze the molecular mechanism of photoexcitation dynamics in bisdiimine copper(I) complexes. The results of non-adiabatic molecular dynamics simulations showed that the surrounding solvent molecules have a significant effect on the photoexcitation dynamics. The analysis of the potential energy surface suggests that the singlet highly excited state quickly relaxes to the singlet first excited state. Furthermore, the theoretical analysis of the photophysical properties of various materials such as Au(I) trimer complexes, HBT, and TCNQ were also carried out, and the influence of the solvent on the photophysical properties were particularly clarified.

研究分野：理論化学

キーワード：光励起ダイナミクス 銅錯体 分子シミュレーション 励起状態

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 遷移金属錯体は可視領域に電荷移動やスピン転移、構造変化を伴う電子励起状態を持つために、光増感剤や光触媒などの光学材料としてよく利用されている。しかし、現在用いられている錯体はルテニウムやプラチナなどの高価で希少な遷移金属を用いるものが多い。そのため、安価で豊富な遷移金属を用いる新たな光学材料が求められている。ビスジイミン銅(I)錯体は、(1)可視領域に大きな吸光係数を持つこと、(2)照射により大きな構造変化を起こすこと、(3)電荷移動が起きる励起状態が長寿命であることから安価な光学材料として注目を集めている物質である。この銅錯体は、照射により銅から配位子への電荷移動遷移(MLCT 遷移)が起きると、二つの配位子が平行になろうとする「平坦化」の構造変化が起きる。この構造変化を有効利用すると光分子スイッチへの応用に、また MLCT 遷移による電子移動を有効利用すると光増感剤や光触媒への応用につながるため、様々な実験・理論研究が精力的に行われている。特に近年、色素増感太陽電池において、ルテニウム錯体に代わる光増感剤として期待され、ビスジイミン銅(I)錯体を用いた太陽電池が実際に作られている。しかし、現時点の光電変換効率はルテニウム錯体より劣るため、更なる改良が求められている。この銅錯体をより優れた光学材料とするためには、光励起ダイナミクスを分子レベルで理解して制御する必要がある。しかし、遷移金属錯体の励起状態は多様で複雑なため、理解がほとんど進んでいないのが現状である。例えば最近の時間分解分光法の測定から、光励起により即座に構造変化が起きるのではなく数百フェムト秒の間は四面体構造が保たれること、またその寿命が配位子の置換基や溶媒により大きく異なることが明らかになっている。しかし、なぜそのようなことが起きるのかよく分かっていない。一方、色素増感太陽電池における光増感剤としての利用では、配位子に移った電子が電極へと渡らずに元の銅イオンへと戻って失活してしまう電荷再結合が問題となっている。しかし、電荷再結合を防ぐための分子デザインは未だはっきりしていない。したがって、銅錯体の光励起ダイナミクスを理解するために、分子シミュレーションによる解析が必要とされている。しかし、従来の手法で遷移金属錯体の光励起ダイナミクスを計算するには、膨大な数の高コストな高精度量子化学計算が必要となる。そのため、最先端のスーパーコンピュータを用いても年単位の時間がかかり、事実上計算不可能である。このような現状を打開すべく、我々は分子シミュレーションと量子化学計算を効率的に結びつける独自の手法を開発し、今まで手の届かなかった凝縮相の化学反応ダイナミクスの解明に取り組んできた。これまで開発してきた手法を展開することで、銅錯体の光励起ダイナミクスの理論解析が可能になると考え、本研究課題の着想に至った。

## 2. 研究の目的

(1) 我々が独自に開発してきた手法を応用・発展させ、ビスジイミン銅(I)錯体の光励起ダイナミクスの分子論的機構を解明することを目的とする。

さらに本研究課題は、様々な物質の光物性の理論解析に展開した。

(2) ビスジイミン銅(I)錯体と類似の光励起ダイナミクスとして、金(I)三量体錯体の光励起ダイナミクスが挙げられる。金(I)三量体錯体は、基底状態は一重項で金イオン3つが折れ曲がり緩く結合した状態であるが、光励起すると項間交差が起きて三重項励起状態となり、3つの金イオンが直線状になり強く結合することが知られている。この光励起ダイナミクスについて、時間分解分光実験により解析が行われてきたが、議論が分かれており、よく分かっていない。そこで、水溶液中の金(I)三量体錯体の一重項基底状態と三重項励起状態の構造を理論計算により解析した。特に、用いる溶媒モデルや量子化学計算手法について検討した。

(3) 2-(2'-ヒドロキシフェニル)ベンゾチアゾール(HBT)の励起状態分子内プロトン移動(ESIPT)における溶媒依存性の解析も行った。このHBTは光励起によりESIPTが起きる典型的な分子であるが、溶媒によりESIPTが起きたり起きなかったりすることが実験的に知られていたが、その理由は不明であった。そこで、量子化学計算を用いてHBTのESIPTの溶媒依存性を解析した。

(4) テトラシアノキノジメタン(TCNQ)の励起エネルギーの溶媒依存性の解析も行った。TCNQは電子受容体分子として有名な有機化合物である。TCNQの励起エネルギーの溶媒依存性は、単純な溶媒の極性だけでは説明できないことが実験的に知られていたが、その理由は不明であった。そこで、量子化学計算や分極連続体モデル、QM/MM法を用いてTCNQの励起エネルギーの溶媒依存性を解析した。

(5) 新規ジテルペノイドの比旋光度の解析を通して、立体構造を解析した。インドネシアのBogor Agricultural UniversityのNovriyandi Hanifのグループにより新たにジテルペノイドが発見された

が、その立体構造を実験で完全には決定できず、1つの不斉炭素の絶対配置が不明であった。そこで、計算で得られた比旋光度を実験値と比較することで、立体構造の決定を試みた。

### 3. 研究の方法

(1) まず、もっとも単純なビスジイミン銅(I)錯体である配位子に置換基がない[Cu(phen)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> (phen = 1,10-phenanthroline)の溶液中の光励起ダイナミクスを解析した。我々が開発した僅かな量子化学計算の結果から凝縮相中の分子のポテンシャル関数を高精度に生成可能な MMSIC 法により銅錯体のポテンシャル関数を作成し、溶媒なし、ジクロロメタン中、アセトニトリル中の3つの条件で非平衡励起状態分子動力学(MD)シミュレーションを行った。また、phen の 2,9 位にメチルが置換された[Cu(dmphen)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> (dmphen = 2,9-dimethyl-1,10-phenanthroline)の励起状態のポテンシャル面の解析を行った。ビスジイミン銅(I)錯体の励起状態のうち、可視領域に大きな吸光係数を持ち、光増感剤として利用されるのは一重項第三励起状態 S<sub>3</sub> である。この S<sub>3</sub> 状態へ光励起すると、内部転換・項間交差を経て、三重項励起状態 T<sub>1</sub> へ到達し、再び基底状態 S<sub>0</sub> に緩和することが知られているが、その途中の機構はよく分かっていない。そこで、S<sub>0</sub> 状態の安定構造から S<sub>3</sub> 状態に励起した際に、どのような状態や構造変化を経て T<sub>1</sub> 状態へ到達するかポテンシャル面を解析した。

(2) 水溶液中の金(I)三量体錯体の構造を解析するために、溶媒モデルとして、分極連続体モデル、分子性液体の積分方程式理論、第一原理 MD シミュレーションを用いて結果を比較した。また、金(I)三量体錯体の電子状態を記述する量子化学計算手法の検討も行った。

(3) HBT の ESIPT の溶媒依存性を量子化学計算により解析した。溶媒として、DMSO、アセトン、ジクロロメタンを用いた。当初は溶媒モデルとして分極連続体モデルを用いたが、溶媒依存性を再現できなかつたため、溶媒分子を露わに量子化学計算に含めた計算を行った。

(4) TCNQ の励起エネルギーの溶媒依存性を分極連続体モデルと QM/MM 法を用いて解析した。溶媒として、ヘキサン、シクロヘキサン、四塩化炭素、クロロホルム、ジクロロメタン、アセトニトリルの 6 種類を用いた。QM/MM 法の計算では、分子力場を用いて MD シミュレーションを行い、そこから 10 サンプルの溶媒和構造を取り出して励起エネルギーを計算した。

(5) 新規ジテルペノイドの比旋光度を量子化学計算により求め、実験結果と比較することで立体構造の決定を試みた。比旋光度は化合物の立体配座に大きく影響するため、GRRM アルゴリズムを用いて安定な立体配座の探索を行い、それぞれの自由エネルギー差を考慮して比旋光度を計算した。

### 4. 研究成果

(1) まず、[Cu(phen)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>の光励起ダイナミクスを解析した。ジクロロメタン中とアセトニトリル中での MD シミュレーションから得られた平坦化の反応速度や反応に伴うコヒーレント振動のスペクトルは実験結果とよく一致した(図 1)。また、溶媒がある場合とない場合では、光励起ダイナミクスに大きな違いがあることが明らかになった。この結果は光励起ダイナミクスの分子シミュレーションにおいて、周囲の環境を露わに考慮する必要があることを意味しており、本研究課題で初めて明らかになったものである。また、[Cu(dmphen)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>のポテンシャル面を詳細に解析した。まず、S<sub>0</sub> 状態では 2 つの配位子がなす角が 90 度で銅と配位子間の距離が等しい D<sub>2h</sub> 対称性が安定となるが、励起状態では MLCT 遷移により C<sub>2v</sub> や C<sub>2</sub> に対称性を崩した方が安定となった。また、S<sub>0</sub> 状態の安定構造付近の C<sub>2v</sub> 対称性で S<sub>3</sub>/S<sub>4</sub>、S<sub>3</sub>(ももとは S<sub>4</sub>/S<sub>2</sub>、S<sub>2</sub>/S<sub>1</sub> のエネルギーの順でポテンシャル面の最小エネルギー交差点が見つかり、S<sub>3</sub> 状態から S<sub>1</sub> 状態まで緩和がスムーズに起きると予想された。さらに、S<sub>1</sub> の安定構造に緩和すると、T<sub>1</sub> から T<sub>4</sub> 状態の最小エネルギー交差点はより高くなることが分かった。このことから、S<sub>1</sub> 状態まで緩和すると、三重項状態への項間交差は起こり辛いと考えられる。

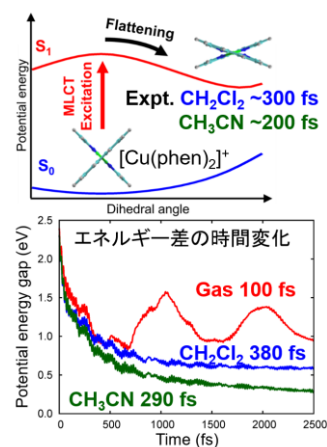


図 1. (上)ビスジイミン銅錯体の光励起ダイナミクスの模式図。(下)ポテンシャルエネルギー差の時間変化。

(2) まず、水溶液中の金(I)三量体錯体を記述するための溶媒モデルの検討を行った。その結果、分極連続体モデルや分子性液体の積分方程式理論で溶媒の平均的な描像を記述するモデルでは、X 線溶液散乱実験で得られている一重項基底状態で緩く非対称に結合している構造を再現できないことが明らかになった。一方、溶質と溶媒の熱揺らぎの効果や溶媒の量子化学的效果を取り込んだ第一原理 MD シミュレーションでは、定性的に実験の傾向を再現した。また、一重項基底

状態の金イオンの結合長は、量子化学計算手法によっても大きく異なり、定量的な記述に分散力補正が必要であることも明らかになった。したがって、この金(I)三量体錯体の光励起ダイナミクスを解析するためには、溶質と溶媒の両方の適切な記述が必要と考えられる。

(3) HBT の ESIPT の溶媒依存性を HBT と溶媒分子の相互作用エネルギーの観点から解析した。溶媒のプロトン受容性が強いと HBT の分子内水素結合が阻害され、ESIPT が起きないことが明らかになった。また、溶媒のプロトン受容性が弱いと HBT がねじれて励起状態と基底状態とのエネルギー差が小さくなり基底状態に失活しやすいことも分かった。これらの計算結果は実験と一致しており、溶媒分子を露わに考慮する必要があることが重要であることが明らかになった。

(4) まず、TCNQ の励起エネルギーの溶媒依存性を分極連続体モデルにより解析した。実験結果と定性的な傾向は一致し、溶媒の電子分極が重要であることが明らかになった。しかし、定量的な再現はできなかつたため、QM/MM 法を用いて解析を行った。TCNQ だけでなく周囲の溶媒も QM 領域に含めて量子化学計算で扱うことで、概ね実験結果を定量的に再現することに成功した。また、塩素を含む溶媒では、溶媒の電子分極を記述するために、大きな基底関数が必要であることが分かった。一部の溶媒では、実験結果と少し異なる計算結果が得られたため、今後、計算条件の検討を含めた詳細な解析を引き続き行う予定である。

(5) まず、立体構造が既知の類似のジテルペノイドの比旋光度を様々な計算条件で求めた。得られた比旋光度が最も実験結果とよく一致した計算条件で新規ジテルペノイドの比旋光度を  $R$  体と  $S$  体で計算したところ、 $S$  体の方が実験結果と良い一致を示した。したがって、新規ジテルペノイドは  $S$  体と考えられる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 12件／うち国際共著 3件／うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Hermawan Idam, Higa Mikako, Hutabarat Philipus Uli Basa, Fujiwara Takeshi, Akiyama Kiyotaka, Kanamoto Akihiko, Haruyama Takahiro, Kobayashi Nobuyuki, Higashi Masahiro, Suda Shoichiro, Tanaka Junichi	4. 巻 17
2. 論文標題 Kabirimine, a New Cyclic Imine from an Okinawan Dinoflagellate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Marine Drugs	6. 最初と最後の頁 353 ~ 353
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/md17060353	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 Kuraoku Daiki, Yonamine Tsunaki, Koja Genta, Yoshida Norio, Arimitsu Satoru, Higashi Masahiro	4. 巻 24
2. 論文標題 Effects of Water Addition on a Catalytic Fluorination of Dienamine	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 3428 ~ 3428
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules24193428	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 Saito Shinji, Higashi Masahiro, Fleming Graham R.	4. 巻 123
2. 論文標題 Site-Dependent Fluctuations Optimize Electronic Energy Transfer in the Fenna-Matthews-Olson Protein	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 9762 ~ 9772
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b07456	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 Fujihashi Yuta, Higashi Masahiro, Ishizaki Akihito	4. 巻 9
2. 論文標題 Intramolecular Vibrations Complement the Robustness of Primary Charge Separation in a Dimer Model of the Photosystem II Reaction Center	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 4921 ~ 4929
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcclett.8b02119	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 Kimura Tetsunari, Lorenz-Fonfria Victor A., Douki Shintaro, Motoki Hideyoshi, Ishitani Ryuichiro, Nureki Osamu, Higashi Masahiro, Furutani Yuji	4. 巻 122
2. 論文標題 Vibrational and Molecular Properties of Mg <sup>2+</sup> Binding and Ion Selectivity in the Magnesium Channel MgtE	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 9681 ~ 9696
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b07967	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 Arimitsu Satoru, Yonamine Tsunaki, Higashi Masahiro	4. 巻 7
2. 論文標題 Cinchona-Based Primary Amine Catalyzed a Proximal Functionalization of Dienamines: Asymmetric -Fluorination of -Branched Enals	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 4736 ~ 4740
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.7b01178	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 Ahmadi Peni, Higashi Masahiro, Voogd Nicole J. de, Tanaka Junichi	4. 巻 15
2. 論文標題 Two Furanosesterterpenoids from the Sponge Luffariella variabilis	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Marine Drugs	6. 最初と最後の頁 249 (8pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/md15080249	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 該当する

1. 著者名 Yoshida Norio, Higashi Masahiro, Motoki Hideyoshi, Hirota Shun	4. 巻 148
2. 論文標題 Theoretical analysis of the domain-swapped dimerization of cytochrome c: An MD and 3D-RISM approach	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 025102 (7pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5009785	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 Tsukamoto Hisao, Higashi Masahiro, Motoki Hideyoshi, Watanabe Hiroki, Ganser Christian, Nakajo Koichi, Kubo Yoshihiro, Uchihashi Takayuki, Furutani Yuji	4. 巻 293
2. 論文標題 Structural properties determining low K <sup>+</sup> affinity of the selectivity filter in the TWIK1 K <sup>+</sup> channel	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Biological Chemistry	6. 最初と最後の頁 6969-6984
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1074/jbc.RA118.001817	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 Yoshiki Toma, Masataka Kunigami, K-jiro Watanabe, Masahiro Higashi, Satoru Arimitsu	4. 巻 189
2. 論文標題 One-pot synthesis and theoretical calculation for trifluoromethylated pyrrolizidines by 1,3-dipolar cycloaddition with azomethine ylides and beta-trifluoromethyl acrylamides	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Journal of Fluorine Chemistry	6. 最初と最後の頁 22-32
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jfluchem.2016.07.013	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 Idam Hermawan, Atsushi Furuta, Masahiro Higashi, Yoshihisa Fujita, Nobuyoshi Akimitsu, Atsuya Yamashita, Kohji Moriishi, Satoshi Tsuneda, Hidenori Tani, Masamichi Nakakoshi, Masayoshi Tsubuki, Yuji Sekiguchi, Naohiro Noda, Junichi Tanaka	4. 巻 15
2. 論文標題 Four Aromatic Sulfates with an Inhibitory Effect against HCV NS3 Helicase from the Crinoid <i>Alloeocomatella polycladia</i>	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Marine Drugs	6. 最初と最後の頁 117
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/md15040117	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 Asaka Akena, Satoru Iuchi, Masahiro Higashi	4. 巻 679
2. 論文標題 Theoretical Study on Photoexcitation Dynamics of a Bis-diimine Cu(I) Complex in Solutions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 60-65
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2017.04.082	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22件（うち招待講演 14件 / うち国際学会 10件）

1. 発表者名 比嘉未香子, 東雅大
2. 発表標題 水溶液中の金三量体錯体の電子状態に関する理論的研究
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 仲 啓志, 東 雅大, 佐藤 啓文
2. 発表標題 HBTの励起状態分子内プロトン移動における溶媒依存性に関する理論的研究
3. 学会等名 研究会「凝縮系の理論化学2020」
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Masahiro Higashi
2. 発表標題 Theoretical study on excitation energy transfer in photosynthetic proteins
3. 学会等名 The 10th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 東 雅大
2. 発表標題 光合成タンパク質複合体の機能解明を目指して
3. 学会等名 QIQBセミナー「量子化学と量子情報・量子生命の接点」(招待講演)
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 Masahiro Higashi
2. 発表標題 Theoretical study on excited-state reactions in condensed phases
3. 学会等名 The International Conference on Materials Research and Innovation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masahiro Higashi
2. 発表標題 Toward a molecular understanding of excitation energy transfer in light-harvesting complexes
3. 学会等名 China-Japan-Korea Workshop on Theoretical & Computational Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 東 雅大
2. 発表標題 凝縮系の励起状態反応ダイナミクスの理論解析
3. 学会等名 第3回環境・生体の関わる物理・化学の研究会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 比嘉 未香子, 東 雅大
2. 発表標題 水溶液中における[Au(CN) <sub>2</sub> ] <sup>-</sup> の電子状態の理論的解析
3. 学会等名 研究会「凝縮系の理論化学」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masahiro Higashi
2. 発表標題 Theoretical analysis of regio- and stereoselectivity of new organic reactions
3. 学会等名 International Symposium on Pure & Applied Chemistry 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Masahiro Higashi
2. 発表標題 Theoretical investigation of excited-state reactions and properties in condensed phases
3. 学会等名 前瞻跨領域基礎科學中心 尖端生物分子探測 專題演講 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Masahiro Higashi
2. 発表標題 Toward quantitative understanding of excitation energy transfer in light-harvesting complexes
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 2017年

1. 発表者名 東 雅大
2. 発表標題 高効率ポテンシャル関数生成手法による光捕集アンテナ中の色素の励起エネルギーの大きさと揺らぎの定量的評価
3. 学会等名 レア・イベントの計算科学 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 東 雅大
2. 発表標題 凝縮系の反応ダイナミクスを記述可能な計算手法の開発と応用
3. 学会等名 北大理論化学研究会：実践理論化学の最前線（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 東 雅大
2. 発表標題 凝縮系の励起状態反応ダイナミクスの定量的理解を目指して
3. 学会等名 第32回量子系分子科学研究セミナー（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 東 雅大, 喜屋武 茜, 亀井 翔矢, 與那嶺 綱希, 有光 暁
2. 発表標題 シンコナルカロイド触媒を用いた, $\alpha$ -不飽和アルデヒドの高立体選択的フッ素化反応に関する理論的研究
3. 学会等名 第20回理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Masahiro Higashi and Shinji Saito
2. 発表標題 Quantitative evaluation of site energies and their fluctuations of pigments in the light-harvesting complex with an efficient method for generating a potential energy surface
3. 学会等名 255th ACS National Meeting & Exposition (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 安慶名 麻華, 井内 哲, 東 雅大
2. 発表標題 分子シミュレーションを用いたビスジイミン銅( )錯体における光励起ダイナミクスの理論的解明
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Asaka Akena, Satoru Iuchi, Masahiro Higashi
2. 発表標題 Theoretical investigation on photoexcitation dynamics of Cu(I) complexes with molecular dynamics simulation: Effects of solvents and substituents
3. 学会等名 52nd Symposium on Theoretical Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 安慶名 麻華, 井内 哲, 東 雅大
2. 発表標題 溶液中におけるCu( )錯体の光励起ダイナミクスに関する理論的研究
3. 学会等名 第39回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Masahiro Higashi
2. 発表標題 Theoretical analysis of site energies and their fluctuations of pigments in the light-harvesting antenna
3. 学会等名 The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 東 雅大
2. 発表標題 新規有機反応における立体・位置選択性の理論的解明
3. 学会等名 IQCE講演会「量子化学で探る化学の最先端2016」(招待講演)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Masahiro Higashi
2. 発表標題 Theoretical investigation of excited states of pigments in the light-harvesting antenna
3. 学会等名 Kickoff To Explore The New Field Of Molecular Soft Matter (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017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