

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 8 日現在

機関番号：12102

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2021

課題番号：19K15524

研究課題名(和文)理論計算に基づく酸塩基複合体中のプロトン伝導機構の解明

研究課題名(英文)Elucidation of proton conduction mechanism in acid-base complexes investigated by theoretical calculations

研究代表者

堀 優太(Hori, Yuta)

筑波大学・計算科学研究センター・助教

研究者番号：40806915

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)：本研究では、イミダゾール(Im)を含む高分子複合体と有機結晶中のプロトン伝導機構を理論計算により調べた。

分子動力学計算から複合体中の水素結合構造やImの運動性、また構造と運動との関係性について議論した。計算・解析の結果、複合体中ではプロトン伝導はGrotthuss型の機構であることが示唆された。

量子化学計算から有機結晶中のプロトン伝導に関わる水素結合構造、プロトン移動、分子運動について議論した。計算・解析の結果、プロトン伝導経路中では、分子間プロトン移動とImの回転運動のカップリングによりプロトン伝導が起こりうることが明らかとなった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、イミダゾールを含む高分子複合体と有機結晶中のプロトン伝導の分子レベルでのメカニズムを理論計算により明らかにした。特にプロトン伝導に関わるプロトンダイナミクスは実験により調べるのが困難であるため、本研究によりその詳細を明らかにすることができた。本研究結果は、今後の高性能なプロトン伝導物質を設計する上で参考になる結果であり、物質開発の展開の足がかりとなる研究成果であると言える。

また、これらの研究で用いた計算手法は、様々なプロトン伝導物質の解析に利用可能であり、今後の継続した解析により、プロトン伝導機構の全体像が明らかになることが期待される。

研究成果の概要(英文)：This work examined proton conduction mechanism in polymer complexes and organic crystals containing imidazole (Im) molecule investigated by theoretical calculations.

Molecular dynamics calculations demonstrated the local hydrogen bonding structures and molecular motions of Im in the polymer complexes as well as the relationship between their structures and dynamics. We suggested that the proton conduction in the polymer complex obeys Grotthuss-type mechanism. Quantum chemical calculations demonstrated the local hydrogen bonding structures, proton transfers, and molecular motions involved in proton conduction in organic crystals. We suggested that proton conduction proceeds by the coupling of intermolecular proton transfer and rotational motion of Im through the proton conduction pathway.

研究分野：理論化学

キーワード：プロトン伝導機構 分子動力学計算 量子化学計算 分子運動 イミダゾール PVPA コハク酸 プロトン移動

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

プロトン伝導物質は固体燃料電池の電解質材料として注目されており、高性能なプロトン伝導物質の開発が盛んに行われている。従来のプロトン伝導物質はプロトン伝導媒体として水分子が用いられるが、100 Å以上では急激にプロトン伝導度が減少するという問題があった。そこで、水の代替物質としてイミダゾール(Im)などの窒素含有複素環分子がプロトンキャリアとして提案されている。Imは、カルボキシ基やホスホン酸基を持つ高分子中に取り込むと複合体(高分子複合体)を形成し、高いプロトン伝導性を示す。またImをジカルボン酸に混ぜると有機結晶を作り同様に高い伝導性を示す(図1)。一方でこれらのプロトン伝導物質のプロトン伝導機構は未だ解明されていない。

Im単体のプロトン伝導は、水素結合を形成したImの「分子間プロトン移動(PT)」と「分子運動」によって発現すると考えられている。一方で、Imの高分子複合体や有機結晶は水素結合構造が多様であるため、水素結合上のPTと分子運動の絡み合いによって発現するとされるプロトン伝導機構の詳細は明らかではない。この複雑なシステムを理解するためには、PTや分子運動、伝導経路など異なる時間や空間スケールで解析するマルチスケール解析が求められる。特に理論計算に注目し、種々の計算手法を組み合わせることによりシームレスな解析が可能である。その結果、プロトン伝導の全容が解明され、高性能なプロトン伝導物質の設計につながると期待される。

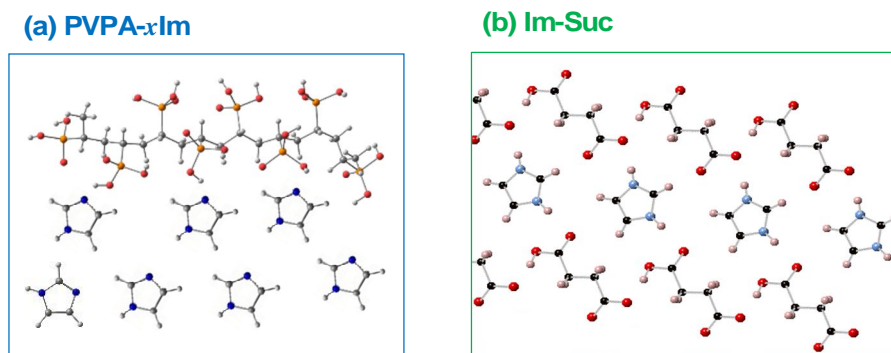


図1: イミダゾール(Im)の高分子複合体と有機結晶。(a) ポリビニルホスホン酸とイミダゾール複合体(PVPA-xIm)と(b) コハク酸イミダゾリウム(Im-Suc)

### 2. 研究の目的

本研究ではImの高分子複合体と有機結晶に対して、Imの局所構造、分子間プロトン移動(PT)、分子運動の理論計算によるマルチスケール解析を行い、プロトン伝導物質中のプロトン伝導機構を解明することを目的とする。得られた知見から、高分子複合体と有機結晶のプロトン伝導機構の相違・類似点について考察し、高性能なプロトン伝導物質設計のための指針を提案する。

### 3. 研究の方法

本研究では、主にホスホン酸基を持つポリビニルホスホン酸(PVPA)とImとの複合体であるPVPA-xImと、ジカルボン酸であるコハク酸とImの有機結晶(コハク酸イミダゾリウム)を取り上げ(図1)、それぞれのプロトン伝導機構の解明に向けた理論解析を行った。以下にそれぞれの計算方法を示す。

#### (1) PVPA-xIm中におけるプロトン伝導機構の解明に向けた解析

分子動力学(MD)計算によりPVPA-xIm( $x$ はホスホン酸基とImのモル比)中の水素結合構造を調べるために、Im間およびImとPVPA間の局所構造を反映した動径分布関数を求めた。さらに、Imの分子ダイナミクスを調べるために、Imの拡散係数および回転の相関時間を求めた。

PVPAとして $n = 16$ の鎖長モデルを用いた。PVPAとImの混合比が $x = 1, 2, 3$ になるようなPVPA-xIm複合体モデルに対してシミュレーションを行った。また、温度による違いを調べるために、350, 400, 450 Kにおいてシミュレーションを行った。

#### (2) コハク酸イミダゾリウム(Im-Suc)中におけるプロトン伝導機構の解明に向けた解析

量子化学計算により、Im-Suc中の水素結合構造を調べるために、振動解析による赤外分光スペクトルシミュレーションを行い、実験により得られているスペクトルの結果と比較した。また、Imの回転とPTに対するポテンシャルエネルギー曲面(PES)の構築を行った。PESの計算にはIm-Sucの結晶構造からクラスターモデルを構築し、結晶環境を考慮するためにONIOM法を用いて、より大きなクラスターモデルを考慮した。さらに、第一原理バンド計算もを行い、モデルの違いについても議論した。量子化学計算および第一原理バンド計算には基本的に密度汎関数理論

(DFT) を用いた。

#### 4. 研究成果

以下では、特に顕著な成果が得られた PVPA-xIm と Im-Suc の解析結果に分けて示す。

##### (1) PVPA-xIm 中におけるプロトン伝導機構の解明に向けた解析

PVPA-xIm における PVPA の P 原子と ImH<sup>+</sup> の N 原子 (N3) および Im の N 原子 (N1, N2) 間の動径分布関数 (RDF) の結果を求めた。計算の結果、ImH<sup>+</sup> や Im と PVPA 間の水素結合構造に起因するピークが得られた。また、N3-P の方が N1-P (N2-P) より RDF のピーク強度が大きいことから、PVPA と Im 間に比べ PVPA と ImH<sup>+</sup> 間の方が強い水素結合を形成することがわかった。また、Im 単体中の RDF についても調べた。計算の結果、Im 間の水素結合構造と Im 間の  $\pi$ -スタック構造を反映したピークが得られた。PVPA-xIm 中の N 原子間の RDF は、Im 単体中のピークと同様の位置に現れた。これにより、PVPA-xIm 中においても系内では Im 単体と同じ局所構造を持った領域が存在していることを明らかにすることができた。また、そのピーク強度は x の値が増加するにつれて大きくなった。したがって、Im の量が増えるにつれて、PVPA-xIm 中では Im 単体と同様の局所構造を持つ領域が形成されていくことを予想することができた。

次に、MD 計算により拡散係数を求めた。Im 単体の拡散係数に比べて PVPA-xIm 中の各分子の拡散係数が著しく減少することがわかった。これは、Im や ImH<sup>+</sup> と PVPA 間での強い水素結合に起因するものだと考えられる。ImH<sup>+</sup> と PVPA の拡散係数は同様の値を示しており、ImH<sup>+</sup> と PVPA 間の水素結合が特に強固であり、運動が制限されていることが示唆された。また、x の値が増加するにつれて Im の拡散係数が増加するので、PVPA-xIm 中では、Im の濃度が Im の運動をコントロールする重要な因子になり得ると予想された。さらに、Im と ImH<sup>+</sup> の回転相関時間を求めた。Im 単体中では、ps オーダーの速い回転運動をしていることがわかった。一方、PVPA-xIm 中では、二成分 (fast, slow) の回転運動を持つことがわかった。Fast 成分は、数 ps の速さであり、その割合は、x の値が増加するにつれて増加した。したがって、fast 成分の運動は、単体中の Im と同様の運動であることが予想された。一方、slow 成分は、ns オーダーの速さを持ち、slow 成分を持つ分子の数は x の値に関わらず一定であった。したがって、slow 成分の運動は、PVPA に束縛された Im や ImH<sup>+</sup> であることが予想された。

PVPA-2Im 中の Im の拡散運動と回転運動に対して、350 ~ 450 K における活性化エネルギーを求めると、回転運動の活性化エネルギーのほうが拡散運動に比べて低く、Im は回転運動の方が起こりやすい事が示唆された。

以上より、PVPA-xIm 複合体中では、PVPA と Im 間の強い水素結合のために、Im や ImH<sup>+</sup> は PVPA 周辺で凝集した状態にあり、PVPA は、プロトン供給源として ImH<sup>+</sup> を安定化させることが示唆された。また、Im の分子運動は、PVPA 周辺ではなく、Im 間のみでの水素結合上で促進されると考えられた。よって、プロトン伝導は、PVPA と Im 間および Im と Im 間の水素結合が関わる Grotthuss 型機構で発現することを理論的に示すことができた。

これらの研究は、主に *ACS Applied Polymer Materials*, *Chemistry Letters*, *Journal of Computer Chemistry*, *Japan* 誌に掲載された。

##### (2) コハク酸イミダゾリウム (Im-Suc) 中におけるプロトン伝導機構の解明に向けた解析

Im-Suc 中の水素結合構造を調べるために、結晶構造から構築したオーダー構造とディスオーダー構造を反映したクラスターモデルに対して DFT 計算による振動数解析を行った。計算の結果、Im のオーダー/ディスオーダーによる水素結合環境の変化により、Im の N-H 振動が高波数側にシフトすることがわかった。実験によると、オーダー構造のみからなる 30 における結晶とオーダー/ディスオーダー構造を持つ 100 の結晶に対する赤外分光スペクトルは、3100 cm<sup>-1</sup> 付近で温度による明らかなピークシフトが得られている。したがって、Im-Suc はオーダーとディスオーダーの構造間相転移により Im 周りの水素結合構造が変化することが理論計算により明らかにすることができた。

次に、Im-Suc 中のプロトン伝導機構の解明を目指し、量子化学計算によって Im-Suc 中の水素結合構造、プロトン移動、分子運動を結びつけるために PES を構築した。得られた PES の結果によると、隣接する Im 間のプロトン輸送過程における構造変化は、まず Im が回転して隣接する Suc へプロトンを渡し、続いて Suc から隣接する Im へプロトンが移り、再び Im 分子が回転する。したがって、このプロセスが繰り返されることにより、プロトンが結晶内を伝導していくと予想され、プロトン移動と Im の回転運動がカップリングすることによりプロトン伝導が促進することが示唆された。また、隣接する Im 間のプロトン輸送過程における律速は、Im と Suc 間のプロトン移動過程であることがわかった。したがって、プロトン伝導度を向上させるためには、プロトンのドナーとアクセプターの強さを調整し、プロトン移動の活性化エネルギーを下げるのが重要であることを理論的に提案することができた。

これらの研究は、主に *The Journal of Physical Chemistry Letters* 誌に掲載された。また、本研究はプレスリリースとして公開されている。

さらに、第一原理バンド計算による結晶モデルに対する同様の PES の構築を試みた。得られたポテンシャルの形状は、量子化学計算によるクラスターモデルの結果と同様の傾向を示した。一方で、全体のポテンシャルエネルギーのバリアは小さくなった。これは、量子化学計算と第一原

理バンド計算の計算精度の違いが反映されている可能性もあるが、クラスターモデルと結晶モデルの違いを反映している可能性が高いことが示唆された。したがって、Im-Suc 中におけるプロトン伝導は結晶全体の競争的な過程として進行することが示唆され、今後のさらなる詳細な伝導機構の解明に向けた足がかりとなる結果が得られた。

本研究では、特に PVPA-xIm と Im-Suc 中のプロトン伝導機構の解明に向けた理論解析を行った。これらの研究で用いた計算手法は、様々なプロトン伝導物質の解析に利用可能であり、今後の継続した解析により、プロトン伝導機構の全体像が明らかになることが期待される。また、本研究によって新たなプロトン伝導物質の開発に向けた理論計算からの知見が得られ、新規プロトン伝導物質開発のための実験との共同研究に発展した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Dekura Shun, Sunairi Yoshiya, Okamoto Kei, Takeiri Fumitaka, Kobayashi Genki, Hori Yuta, Shigeta Yasuteru, Mori Hatsumi	4. 巻 372
2. 論文標題 Effects of mechanical grinding on the phase behavior and anhydrous proton conductivity of imidazolium hydrogen succinate	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Solid State Ionics	6. 最初と最後の頁 115775 ~ 115775
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ssi.2021.115775	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 Yuta, Dekura Shun, Sunairi Yoshiya, Ida Tomonori, Mizuno Motohiro, Mori Hatsumi, Shigeta Yasuteru	4. 巻 12
2. 論文標題 Proton Conduction Mechanism for Anhydrous Imidazolium Hydrogen Succinate Based on Local Structures and Molecular Dynamics	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 5390 ~ 5394
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.1c01280	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 Nakanishi Takumi, Hori Yuta, Wu Shuqi, Sato Hiroyasu, Okazawa Atsushi, Kojima Norimichi, Horie Yusuke, Okajima Hajime, Sakamoto Akira, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Sato Osamu	4. 巻 59
2. 論文標題 Three Step Spin State Transition and Hysteretic Proton Transfer in the Crystal of an Iron(II) Hydrazone Complex	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 14781 ~ 14787
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202006763	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 Yuta, Suetake Toshiya, Shigeta Yasuteru, Ida Tomonori, Mizuno Motohiro	4. 巻 50
2. 論文標題 Molecular Motions of Imidazole in Poly(vinylphosphonic acid)-Imidazole Composites Investigated by Molecular Dynamics Simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 17 ~ 20
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.200635	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 Yuta, SUETAKE Toshiya, IDA Tomonori, MIZUNO Motohiro, SHIGETA Yasuteru	4. 巻 19
2. 論文標題 Proton Conduction Mechanism in Proton-Conducting PVPA-xIm Composites Investigated by Theoretical Approaches	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 131 ~ 132
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2020-0028	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 Hori Yuta, Suetake Toshiya, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Shigeta Yasuteru, Ida Tomonori, Mizuno Motohiro	4. 巻 2
2. 論文標題 Local Structures and Dynamics of Imidazole Molecules in Poly(vinylphosphonic acid)-Imidazole Composite Investigated by Molecular Dynamics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Applied Polymer Materials	6. 最初と最後の頁 1561 ~ 1568
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsapm.9b01222	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 Ida Tomonori, Nishida Manami, Hori Yuta	4. 巻 123
2. 論文標題 Revisiting Formic Acid Decomposition by a Graph-Theoretical Approach	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 9579 ~ 9586
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b05994	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 Miyaniishi Mayuko, Abe Tsukasa, Hori Yuta, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 58
2. 論文標題 Role of Amino Acid Residues for Dioxygen Activation in the Second Coordination Sphere of the Dicopper Site of pMMO	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 12280 ~ 12288
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b01752	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 Nakanishi Takumi, Hori Yuta, Sato Hiroyasu, Wu Shu-Qi, Okazawa Atsushi, Kojima Norimichi, Yamamoto Takashi, Einaga Yasuaki, Hayami Shinya, Horie Yusuke, Okajima Hajime, Sakamoto Akira, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Sato Osamu	4. 巻 141
2. 論文標題 Observation of Proton Transfer Coupled Spin Transition and Trapping of Photoinduced Metastable Proton Transfer State in an Fe(II) Complex	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 14384 ~ 14393
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b07204	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 Yuta, Abe Tsukasa, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 92
2. 論文標題 Mechanistic Insights into Methane Oxidation by Molecular Oxygen under Photoirradiation: Controlled Radical Chain Reactions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1840 ~ 1846
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190171	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 Yuta, Shiota Yoshihito, Ida Tomonori, Yoshizawa Kazunari, Mizuno Motohiro	4. 巻 685
2. 論文標題 Local structures and electronic properties of In atoms in In-doped ZnO	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Thin Solid Films	6. 最初と最後の頁 428 ~ 433
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tsf.2019.05.047	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15件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 堀 優太、出倉 駿、井田 朋智、水野 元博、森 初果、重田 育照
2. 発表標題 量子化学計算によるコハク酸イミダゾリウム結晶中のプロトン伝導機構解析
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuta Hori, Shun Dekura, Tomonori Ida, Motohiro Mizuno, Hatsumi Mori, Yasuteru Shigeta
2. 発表標題 Local structures and molecular dynamics in the proton-conducting imidazolium hydrogen succinate
3. 学会等名 The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shun Dekura, Yoshiya Sunairi, Kei Okamoto, Fumitaka Takeiri, Genki Kobayashi, Yuta Hori, Yasuteru Shigeta, Hatsumi Mori
2. 発表標題 Structural Transition Involving Molecular Dynamics and Anhydrous Proton Conductivity in Imidazolium Hydrogen Dicarboxylates
3. 学会等名 The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuta Hori, Toshiya Suetake, Tomonori Ida, Motohiro Mizuno, Yasuteru Shigeta
2. 発表標題 Local structures and molecular dynamics in the anhydrous proton-conducting PVPA-Im composite
3. 学会等名 The Material Research Meeting 2021 (MRM2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 堀 優太、出倉 駿、井田 朋智、水野 元博、森 初果、重田 育照
2. 発表標題 量子化学計算による有機結晶中のプロトン伝導機構の理論解析
3. 学会等名 第15回 物性科学領域横断研究会 (領域合同研究会) (招待講演)
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 堀 優太、出倉 駿、井田 朋智、水野 元博、森 初果、重田 育照
2. 発表標題 コハク酸イミダゾリウム結晶中のプロトン伝導機構の理論的解析
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 堀優太、末武鋭也、井田朋智、水野元博、重田育照
2. 発表標題 プロトン伝導性PVPA-xIm複合体の分子ダイナミクス
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2020年秋季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 堀優太、末武鋭也、井田朋智、水野元博、重田育照
2. 発表標題 分子動力学計算によるプロトン伝導性PVPA-xIm複合体の局所構造と分子ダイナミクス
3. 学会等名 日本化学会 第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 堀優太、石川航平、庄司光男、重田育照
2. 発表標題 酸化型[NiFe]ヒドロゲナーゼの活性中心についての理論的研究
3. 学会等名 量子生命科学会 第二回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuta Hori, Toshiya Suetake, Tomonori Ida, Motohiro Mizuno, Yasuteru Shigeta
2. 発表標題 Theoretical Study of Local Structures and Molecular Motions in the Proton-Conduction Composite Material
3. 学会等名 2nd International Symposium on Hydrogen Energy and Energy Technologies (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堀優太、末武鋭也、井田朋智、水野元博、重田育照
2. 発表標題 イミダゾールを含む酸塩基複合体中の水素結合構造と分子運動性の理論的解析およびプロトン伝導機構の考察
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 池田京、堀優太、塩田淑仁、M. Haris Mahyuddin, Staykov Aleksandar, 松本崇弘、吉澤一成、小江誠司
2. 発表標題 イリジウム錯体のH-H結合開裂とO-O結合形成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 堀優太、阿部司、塩田淑仁、重田育照、伊東忍、吉澤一成
2. 発表標題 銅-酸素錯体によるカルボニル化合物の触媒的C-C結合形成反応の機構解析
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 末武鋭也、杉澤宏樹、堀優太、井田朋智、水野元博
2. 発表標題 分子動力学法を用いた有機酸複合体中イミダゾールの分子運動解析
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 井田朋智、西田愛美、堀優太
2. 発表標題 ギ酸分解の化学反応ネットワーク
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

堀優太(筑波大学研究者総覧、TRIOS) <a href="https://trios.tsukuba.ac.jp/researcher/0000004283">https://trios.tsukuba.ac.jp/researcher/0000004283</a> 堀優太(researchmap) <a href="https://researchmap.jp/yuhori">https://researchmap.jp/yuhori</a> <a href="https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/public/hori/">https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/public/hori/</a> 堀優太(筑波大学研究者総覧、TRIOS) <a href="https://trios.tsukuba.ac.jp/researcher/0000004283">https://trios.tsukuba.ac.jp/researcher/0000004283</a> 堀優太(researchmap) <a href="https://researchmap.jp/yuhori">https://researchmap.jp/yuhori</a> 堀優太(ORCID) <a href="https://orcid.org/my-orcid">https://orcid.org/my-orcid</a>
--

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