

令和 6 年 5 月 22 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2020～2023

課題番号：20H02685

研究課題名(和文)力学刺激環境を取り扱う理論化学計算手法の開発と新しい反応コンセプトの構築

研究課題名(英文) Development of Reaction Concepts and Computational Methods for Chemical Reactions under Mechanochemical Stimulations

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) 13,600,000円

研究成果の概要(和文)：外力を導入した理論計算手法を開発し、メカノケミストリにおける特異な化学反応原理について研究した。機械的刺激によって化学反応の選択性が変化するという実験報告が急増しているが、理論的な理解は進んでいなかった。ボールミルを用いたキチンの加水分解において側鎖の加水分解より解重合が優先される実験結果、高インデックス界面への外力刺激に対するFischer-Tropsch反応活性がBEP則を逸脱しつることを示す計算結果、ボールミルを用いたシクロプロパン化反応において狭隘反応場が選択性を向上する計算結果を示し、力学的刺激下の反応機構を明らかにした。開発したプログラムはGitHubにて公開している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

力学的刺激による化学反応の促進は、局所加熱による反応性の向上と理解されている。これに対し、反応選択性の変化については単なる熱的な解釈を越えた理解が必要であった。このような実験事実に対して、様々な解釈が行われてきたが、これを裏付ける理論的研究が必要とされてきた。本研究では、力学的刺激を露わに導入した計算を行うことで、反応機構を提案することで提案されてきた解釈を理論的に検証し、力学的刺激による活性促進効果を予測した。また、使用した計算プログラムはGaussian16など各種の電子状態計算プログラムと接続して使用でき、研究成果のオープンリソース化による社会での活用が期待できる。

研究成果の概要(英文)：We have developed a computational method that introduces externally induced forces and studied the principle of unique chemical reactions in mechanochemistry. Although there has been a rapid increase in the number of experimental reports showing that mechanical stimuli change the selectivity of chemical reactions, the theoretical understanding of this phenomenon has not yet progressed. The experimental results that depolymerization is prioritized over side chain hydrolysis in the hydrolysis of chitin using a ball mill, the computational results showing that the Fischer-Tropsch reaction activity can deviate from the BEP rule in response to external force stimulation of a high-index interface, and the computational results showing that a narrow reaction field changes selectivity in cyclopropanation reactions using a ball mill were reported. The reaction mechanism under mechanical stimuli was elucidated. The developed program is available on GitHub.

研究分野：理論・計算化学

キーワード：メカノケミストリ 反応原理 電子状態 ポテンシャル面

## 1. 研究開始当初の背景

2010年以降、メカノケミストリに関する報告が急激に増加している。ボールミルや乳鉢の機械的刺激による反応の加速効果は90年代から報告されてきたが、反応の選択性的変化についての報告が急増してきた。機械的刺激によってウッドワード・ホフマン則やBronsted-Evans-Planyi則が破れたとする報告[1, 2]がなされた。また、共同研究者である福岡らは、多糖類の解重合において、機械的刺激により主反応である解重合の選択性が向上することを報告している[3]。このような選択性的変化は、力学的刺激下でのポテンシャル面の変化、すなわち經由する反応経路の変化(メカニズムの変化)を示唆しており、未解明の化学反応原理が存在する可能性がある。

このような反応系では、反応が起きる活性サイトに対して様々な外力が働いて、化学現象の駆動力になっている。それに対して、理論化学計算におけるモデル反応系は、計算資源や計算時間の制約によって実在系的一部分にならざるを得ない。この実在系とモデル系のギャップは、理論・計算化学分野において克服すべき重要な課題である。我々はこれまで、QM/MM法[4]やその拡張法[5]の開発によって、活性サイトに働く分子間相互作用を露わに考慮することで実在系へのアプローチを行ってきた。

また、ポテンシャル面上のエネルギー極小点や遷移状態を求めることは、化学反応研究の常套手段となり、専門家でなくとも利用できる研究ツールとなった。しかし、特異な分子構造を求める計算技術は依然として開発を要する重要な課題である。我々は人工的な外力を導入することで、ポテンシャルエネルギー面を制御して、系間交差[6]や特定のイオン化ポテンシャルを示す構造[7]を求める手法を開発・応用してきた。

## 2. 研究の目的

本研究では、外力を導入した理論計算手法を開発すること、およびメカノケミストリにおいて特徴的な反応場の計算モデルを構築することにより、メカノケミストリにおける特異な化学反応原理について研究する。機械的刺激によって化学反応の選択性が変化するという実験報告が急増しているが、理論的な理解は進んでいない。選択性的変化はポテンシャル面の変化を示唆し、特異な反応原理が潜在する可能性がある。いくつかの基本的反応を取り上げて、力学的刺激下の反応原理を明らかにすることを計画している。

## 3. 研究の方法

分子系に外力をかける方法として、外力の力点を系中に明示的に含める方法は特に新規の開発を必要としない。外力の力点となる構造を計算モデルに含め、分子系に力学的ストレスをかけることができる。この手法では、分子系にける外力の大きさや方向を明示的に指定することはできず、外力の大きさは力点となる構造と分子の間に働く力によって評価する。簡易な方法ではあるが、一定の外力に対する反応性的変化を評価することができない。この方法は、Ru表面におけるCO解離の研究およびAg薄膜による狭隙空間におけるシクロプロパン化反応の研究において使用した。

他方で、外力を外力項として明示的に与え、反応経路に沿ったポテンシャルエネルギー変化として導入することができる。

$$E_{total}^{Mechano} = E_{total} + E_{ext}^{Mechano}$$

$$E_{ext}^{Mechano}(s) = \int_{s_0}^s F_{ext}^{Mechano}(s') ds'$$

$E_{ext}^{Mechano}$ 、 $F_{ext}^{Mechano}$ 、 $s$ はそれぞれ力学的刺激の下でのポテンシャルエネルギー、外力、反応経路外力の定義が一般的であり多様な外力を考慮できる。Martinezらは外力として定数を与え、force modified potential energy surface (FMPES)として先駆的な研究を行った[8]。また、同様にMarxらは、EFEI (external force explicitly included)として、FMPESをより一般化した外力を導入した[9]。我々は、キチンの解重合に関する研究において、FMPESを用いた計算を行った。

さらに、これらの外力を印加する一般的なプログラムを開発し、OpenMechanochemとして公開している[10,11]。

## 4. 研究成果

## (1) キチンの選択的加水分解における力学的刺激の効果

甲殻類の殻を構成する多糖類であるキチンでは、図1に示すように糖単量体間を結ぶグリコシド結合と側鎖のアミド結合の二種類が加水分解の対象になる。単なる酸触媒では側鎖のアミド結合において脱アセチル化が副反応として進行するため、グルコサミンが得られる。アミド結合を保持することができれば、高付加価値を有するN-アセチルグルコサミンが得られるので、加水分解の選択性を向上する研究がなされていた。福岡らは、ボールミルによる力学的刺激を加えると、グリコシド結合の加水分解が選択的に進行する実験結果が見出した[3]。ボールミルの

衝突によって反応物が圧延されることから、キチンへの張力が加水分解反応の活性化障壁に及ぼす影響を計算によって評価した[12]。計算には、本研究で開発したプログラムを用い、FMPEsを用いた。電子状態計算には Gaussian16 を使用した。

解重合と脱アセチル化の活性化エネルギーは、外力が存在しない場合はほぼ等しく、選択性が得られないという実験結果に対応している。他方で、計算モデルとしての二量体に対して異なる幾つかの方向から張力を加えたところ、脱アセチル化の活性化エネルギーはほとんど変化しなかったのに対し、加水分解については活性化エネルギーが低下する結果が得られた(図2)。その原因について解析したところ、解重合における反応始原系のエネルギーが不安定化し、その分子構造が遷移状態に類似した構造に変化していることが見出された。これに対して、遷移状態の構造は張力による影響をあまり受けなかった。これは、比較的柔らかい二面角が張力によって変化し、遷移状態に近い構造に変化したことによる。自然軌道を用いて軌道間相互作用を解析したところ、この構造変化に付随して、六員環に含まれる酸素の非共有電子対がグリコシド結合の  $\sigma^*$  軌道に供与され、遷移状態の安定化に寄与している結果が見出された。この結果、グリコシド結合の切断が容易になると考えられる。さらに、この電子対供与によりグリコシド結合に含まれる酸素原子の塩基性が強まっており、加水分解の端緒となるプロトン化を受けやすくなっていることも明らかになった。これらの結果は、アメリカ化学会の *J. Phys. Chem. A* に掲載され、supplementary cover image に採用された。

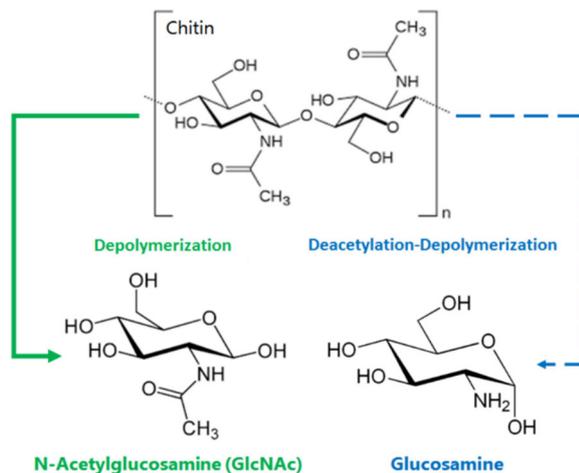


図1. キチンにおける二種類の加水分解反応。(緑) 解重合および(青) 脱アセチル化を伴う解重合。

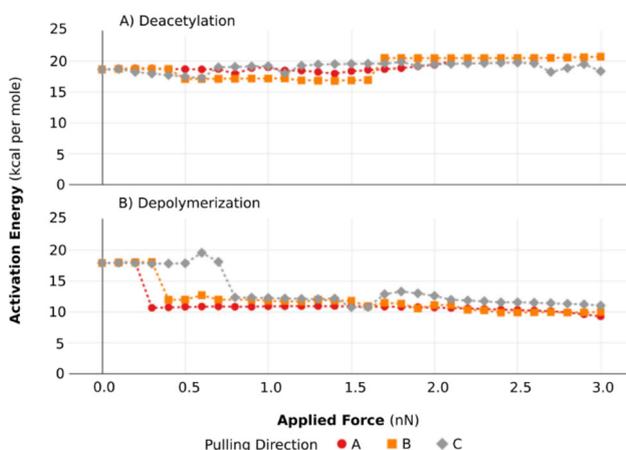


図2. (A)脱アセチル化、(B)解重合の活性化エネルギーにおける張力の効果

## (2) 触媒の圧延が Ru 触媒による CO 解離に及ぼす効果

不均一系触媒作用における格子ひずみの影響の原因について、理論計算に基づく研究が近年進みつつある[2]。固体触媒においては、Brønsted-Evans-Polyani (BEP) 則と呼ばれる自由エネルギー線型関係がよく成立している。類似の反応系において、分子の吸着エネルギーと反応の活性化エネルギーが比例する結果が広く知られている。このことは、活性が過度に向上すると吸着種による被毒が進行して、触媒サイクルが回転しないことを意味している。従って、BEP 則を逸脱する触媒設計指針の探索という意味でも、触媒の圧延効果に関心を持たれている。そこで本研究では、フィッシャー・トロプシュ反応に用いられる Ru 触媒による CO 解離吸着を取り上げた。

Ru 触媒について、テラスである(0001)面とステップを有する(1015)面について、等方性および異方性ひずみを導入し、CO 解離活性に及ぼす影響を理論計算により検討した。図3には等方的に Ru(1015)表面にひずみを導入した際の計算結果について示す。CO の吸着エネルギーは、圧力(負の strain)に対しては減少し、張力(正の strain)に対しては増加している。この傾向は、(0001)面においても共通にみられる効果であり、張力によって Ru-Ru 距離が伸長すると、Ru 間の相互作用が弱くなった結果、吸着種との相互作用が強くなったと考えられる。この結果は、d-band center の解析結果とも符合しており、張力によって、Ru の d-band center がエネルギー的に浅くなった結果、CO との吸着エネルギーが増大したものと考えられる。

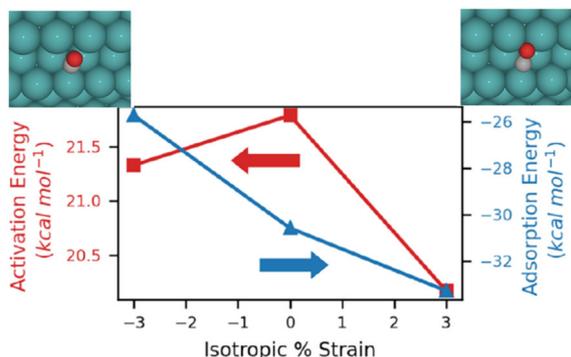


図3. 格子歪みを導入した Ru(1015)にみられる、BEP 則に反した活性化障壁の低下

活性化エネルギーについては、圧力に対しては吸着エネルギーの増大と共に、活性化エネルギーの減少がみられ、BEP 則に符合する結果が得られた。この結果は、Ru(0001)面においても同様であった。他方で、張力に対しては、吸着エネルギーが減少するのに対して、活性化障壁が減少している結果が見出された。この結果は、ステップのある Ru(1015)面に特異的な結果であり、BEP 則に反するものである (図3)。この効果は、Ru への CO 吸着エネルギーにおける触媒の圧延の効果が、反応始原系と遷移状態では異なることに由来することが示された。潜在的に新しい反応経路が存在しうることを示した本研究成果は J. Phys. Chem. C 誌に掲載され、supplementary cover image に採用された[13]。

### (3) 銀薄膜存在下でボールミルを使用したシクロプロパン化反応の選択性

メカノケミストリの化学合成への応用は、熱や光化学的活性化では不可能な新しい反応経路を可能にし、新しい化学を切り開きつつある。メカノケミカル合成における最近の傾向の一つとして、機械的な力によってもたらされる触媒活性を増強するために金属触媒を用いる手法があげられる。遷移金属をはじめとする金属触媒は、多くの化学合成に応用されてきた。本研究では、DFT 計算を用いて、銀箔を触媒として用いたメカノケミカル立体選択的シクロプロパン化反応における選択性の起源を研究した。

単なる銀箔表面では、立体選択的な反応が起きることを裏付ける結果は得られなかった。そこで、銀箔存在下でボールミル刺激を行うことで、銀箔上に挟まれた環境下においてシクロプロパン化反応が起きる状況を仮定した。

単一のスラブ (外力のない系に相当) を使用した場合、実験的に観察された選択性は再現されなかった。そこで、外力の力点として銀箔が上下に存在する反応場 (スラブサンドイッチ) を想定した (図4)。ボールミルが移動する時間スケールは反応の時間スケールより十分に長いので、スラブ間距離は固定し、スラブ間距離を変化させて反応のエネルギープロファイルに及ぼす影響を調べることにした。その結果、E 異性体を生成する反応経路の活性化エネルギーが低いことが示され、実験的に観測された主要生成物と一致した。また、スラブ間距離が短いほど活性化障壁が低下することが示された。さらに、距離に依存した反応経路の選択性が観察された。スラブ間距離が大きいほど 1 段階機構が好まれ、スラブ距離が短い場合には 2 段階機構が好まれることが示された。この結果は、機械的制約が反応の活性化と経路の選択性の両方を担うことを示唆している。

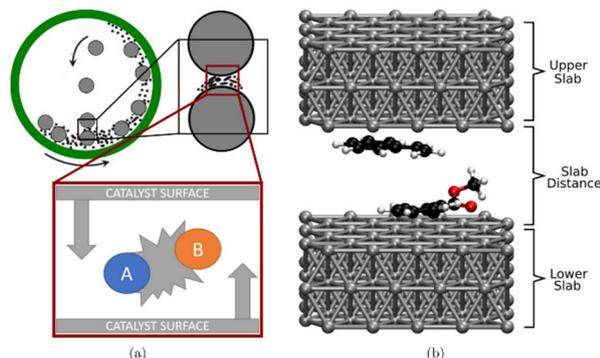


図4. 銀箔存在下においてボールミル刺激を導入したシクロプロパン化反応モデル。(a) ボールミルに挟まれた銀箔、(b) スラブサンドイッチ。銀箔に挟まれたシクロプロパン化反応の基質。

以上を総括すると、力学的刺激として導入されているボールミルと触媒の圧延に関する効果を計算モデリングと DFT 計算によって解析した。外力の導入による反応選択性への影響の起源として、(1) 反応物の構造が遷移状態と類似の構造に変化するために、特定の反応経路が選択されること、(2) 触媒表面の特殊性と触媒の圧延効果が合わさることで BEP 則から外れた反応活性が起きること、(3) ボールミル環境における狭隘反応場が、反応を活性化すると同時に反応選択性を変化させることを示した。

### References

- [1] C. R. Hickenboth, J. S. Moore, S. R. White, N. R. Sottos, J. Baudry, S. R. Wilson, *Nature* 446, 423-427 (2007).
- [2] A. Khorshidi, J. Violet, J. Hashemi, A. A. Peterson, How strain can break the scaling relations of catalysis, *Nat. Catal.* 1, 263-268 (2018).
- [3] M. Yabushita, H. Kobayashi, K. Kuroki, S. Ito, A. Fukuoka, *Catalytic Depolymerization of Chitin with Retention of N-Acetyl Group*, *ChemSusChem* (2015) 8(22), 3760-3763.
- [4] J. Hasegawa, K. Fujimoto, B. Swerts, T. Miyahara, H. Nakatsuji, Excited States of GFP Chromophore and Active Site Studied by the SAC-CI method: Effect of Protein-environment and Mutations, *J. Comp. Chem.* 28(15), 2443-2452 (2007).
- [5] K. Yanai, K. Ishimura, A. Nakayama, J. Hasegawa, A First-Order Interacting Space Approach to Excited-State Molecular Interaction: Solvatochromic Shift of p-Coumaric Acid and Retinal Schiff Base, *J. Chem. Theory Comput.*, 14, 3643-3655 (2018).
- [6] Y. Kitagawa, Y. Chen, N. Nakatani, A. Nakayama, J. Hasegawa, A DFT and multi-

configurational perturbation theory study on O<sub>2</sub> binding to a model heme compound via the spin-change barrier, Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 18137-18144 (2016).

[7]I. Harada, A. Nakayama, J. Hasegawa, Constraint structure optimization to a specific minimum using ionization energy, J. Comput. Chem., 40, 507-514 (2019).

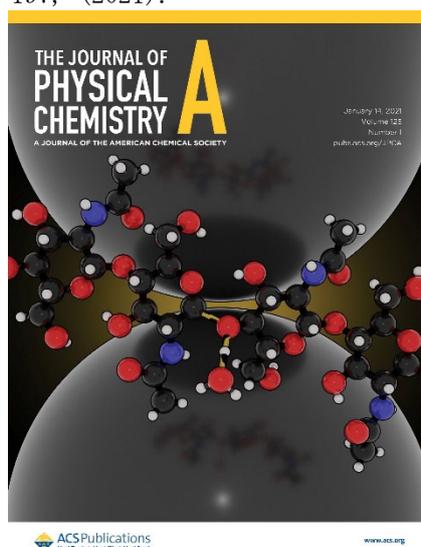
[8]Ong, M. T.; Leiding, J.; Tao, H.; Virshup, A. M.; Martinez, T. J. First principles dynamics and minimum energy pathways for mechanochemical ring opening of cyclobutene. J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 6377-6379.

[9]Ribas-Arino, J.; Shiga, M.; Marx, D. Understanding covalent mechanochemistry. Angew. Chem., Int. Ed. 2009, 48, 4190-4193.

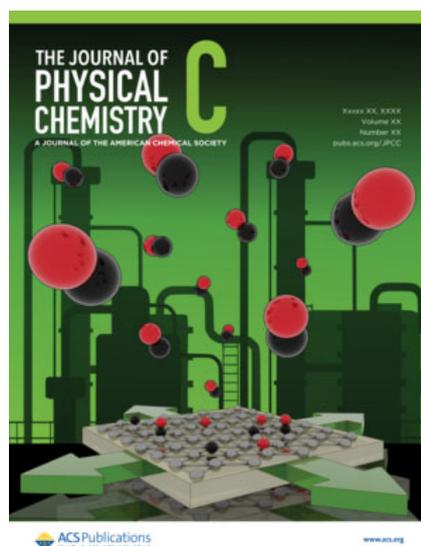
[10]D. P. De Chavez, J. Hasegawa, OpenMechanochem: A Python module for mechanochemical simulations, SoftwareX, 16, 100879 (8 pages). (2021)

[11]<https://pypi.org/project/OpenMechanochem/>

[12]D. P. De Chavez, H. Kobayashi, A. Fukuoka, J. Hasegawa, On the Electronic Structure Origin of Mechanochemically Induced Selectivity in Acid Catalyzed Chitin Hydrolysis, J. Phys. Chem. A, 125, 187-197, (2021).



[13]D. De Chavez, J. Hasegawa, Revisiting Activity Tuning using Lattice Strain: CO Decomposition in Terrace Ru(0001) and Stepped Ru(1015) Surfaces, J. Phys. Chem. C 126, 9324-9333 (2022)



## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計56件（うち査読付論文 56件 / うち国際共著 10件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Dostagir Nazmul Hasan MD, Tomuschat Carlo Robert, Oshiro Kai, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Fukuoka Atsushi, Shrotri Abhijit	4. 巻 4
2. 論文標題 Mitigating the Poisoning Effect of Formate during CO <sub>2</sub> Hydrogenation to Methanol over Co-Containing Dual-Atom Oxide Catalysts	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 JACS Au	6. 最初と最後の頁 1048 ~ 1058
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacsau.3c00789	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 Chen Yue, Miyazaki Ray, Sakaki Shigeyoshi, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 128
2. 論文標題 A Multiconfigurational Wave Function Theoretical Study on Electronic Structure and Magnetic Susceptibility of Dilanthanide Single Molecule Magnet	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 81 ~ 88
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.3c05865	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 Oshiro Kai, Gao Min, Han Lupeng, Zhang Dengsong, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 127
2. 論文標題 Theoretical Investigation of the Alkali Metal Poisoning Tolerance Mechanism of CeO <sub>2</sub> -Containing Fe and H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> Additives	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 18914 ~ 18925
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c03644	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 Deng Jiang, Cai Sixiang, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Yao Heyan, Shen Yongjie, Si Zhiping, Song Jiayu, Zhang Dengsong	4. 巻 13
2. 論文標題 Crystal-in-Amorphous Vanadate Catalysts for Universal Poison-Resistant Elimination of Nitric Oxide	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 12363 ~ 12373
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.3c02571	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 Liu Can, Lu Bang, Ariga-Miwa Hiroko, Ogura Shohei, Ozawa Takahiro, Fukutani Katsuyuki, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Shimizu Ken-ichi, Asakura Kiyotaka, Takakusagi Satoru	4. 巻 145
2. 論文標題 Dynamic Behavior of Intermediate Adsorbates to Control Activity and Product Selectivity in Heterogeneous Catalysis: Methanol Decomposition on Pt/TiO <sub>2</sub> (110)	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 19953 ~ 19960
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.3c06405	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 Apilardmongkol Pavee, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Parasuk Vudhichai	4. 巻 125
2. 論文標題 DFT insight into metals and ligands substitution effects on reactivity of phenoxy-imine catalysts for ethylene polymerization	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Graphics and Modelling	6. 最初と最後の頁 108586 ~ 108586
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmgm.2023.108586	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 Ohmura Shuhei, Katagiri Kei, Kato Haruna, Horibe Takahiro, Miyakawa Sho, Hasegawa Jun-ya, Ishihara Kazuaki	4. 巻 145
2. 論文標題 Highly Enantioselective Radical Cation [2 + 2] and [4 + 2] Cycloadditions by Chiral Iron(III) Photoredox Catalysis	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 15054 ~ 15060
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.3c04010	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 Yamashita Kotaro, Sato Kota, Tanji Yutaka, Hasegawa Jun ya, Fujihara Tetsuaki	4. 巻 18
2. 論文標題 Paddle Wheel Dirhodium Complexes Bearing Bulky Carboxylate Ligands: Synthesis and Catalysis in Carbene Insertion Reactions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	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/asia.202300223	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 Shiraogawa Takafumi, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 127
2. 論文標題 Optimization of General Molecular Properties in the Equilibrium Geometry Using Quantum Alchemy: An Inverse Molecular Design Approach	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 4345 ~ 4353
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.3c00205	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 Chiba Takahiro, Iida Kenji, Furukawa Shinya, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 25
2. 論文標題 First-principles study on unidirectional proton transfer on anatase TiO2 (101) surface induced by external electric fields	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 9454 ~ 9460
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CP00577A	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 Xue, Ratanasak Manussada, Kon Kazumasa, Hasegawa Jun-ya, Ishihara Kazuaki	4. 巻 14
2. 論文標題 Bulky magnesium and sodium bisphenoxide catalysts for chemoselective transesterification of methyl (meth)acrylates	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 566 ~ 572
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2SC05413B	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 Miyazaki Ray, Iida Kenji, Ohno Shohei, Matsuzaki Tsuyoshi, Suzuki Takeyuki, Arisawa Mitsuhiro, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 41
2. 論文標題 Substrate-Assisted Reductive Elimination Determining the Catalytic Cycle: A Theoretical Study on the Ni-Catalyzed 2,3-Disubstituted Benzofuran Synthesis via C-O Bond Activation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 3581 ~ 3588
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.2c00419	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 Kato Yoshimi, Yoshino Tatsuhiko, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Kojima Masahiro, Matsunaga Shigeki	4. 巻 144
2. 論文標題 Iron/Photosensitizer Hybrid System Enables the Synthesis of Polyaryl-Substituted Azafluoranthenes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 18450 ~ 18458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c06993	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, Tanaka Shinji, Kitamura Masato, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 87
2. 論文標題 Asymmetric Dehydrative Cyclization of Allyl Alcohol to Cyclic Ether Using Chiral Bronsted Acid/CpRu(II) Hybrid Catalysts: A DFT Study of the Origin of Enantioselectivity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 13062 ~ 13072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.2c01576	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 Shiraogawa Takafumi, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 13
2. 論文標題 Exploration of Chemical Space for Designing Functional Molecules Accounting for Geometric Stability	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 8620 ~ 8627
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.2c02355	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 Hosaka Ryu, Asada Daiki, Cao Ji, Tamura Masazumi, Nakagawa Yoshinao, Tomishige Keiichi, Hasegawa Jun-ya, Nakayama Akira	4. 巻 126
2. 論文標題 Reaction Mechanism of Deoxydehydration by Ceria-Supported Monomeric Rhenium Catalysts: A Computational Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 11566 ~ 11573
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c02944	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 Siwairam Siwarut, Bopp Philippe A., Ponchai Panyapat, Soetens Jean-Christophe, Hasegawa Jun-ya, Schmid Rochus, Bureekaew Sareeya	4. 巻 359
2. 論文標題 MD studies of methanol confined in the metal-organic framework MOF MIL-88B-C1	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Liquids	6. 最初と最後の頁 119252 ~ 119252
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molliq.2022.119252	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 De Chavez Danjo, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 126
2. 論文標題 Revisiting Activity Tuning Using Lattice Strain: CO Decomposition in Terrace Ru(0001) and Stepped Ru(1015) 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 9324 ~ 9333
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c00902	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 Kuboon Sanchai, Deng Jiang, Gao Min, Faungnawakij Kajornsak, Hasegawa Jun-ya, Zhang Xiaoyu, Shi Liyi, Zhang Dengsong	4. 巻 402
2. 論文標題 Unraveling the promotional effects of NiCo catalysts over defective boron nitride nanosheets in dry reforming of methane	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Catalysis Today	6. 最初と最後の頁 283 ~ 291
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cattod.2022.04.031	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 Apilardmongkol Pavee, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun ya, Parasuk Vudhichai	4. 巻 14
2. 論文標題 Exploring the Reaction Mechanism of Heterobimetallic Nickel Alkali Catalysts for Ethylene Polymerization: Secondary Metal Ligand Cooperative Catalysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ChemCatChem	6. 最初と最後の頁 e2022000
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.202200028	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, Maekawa Shinsuke, Saiki Yuta, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Ema Tadashi	4. 巻 24
2. 論文標題 Deoxygenative CO <sub>2</sub> conversions with triphenylborane and phenylsilane in the presence of secondary amines or nitrogen-containing aromatics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Green Chemistry	6. 最初と最後の頁 2385 ~ 2390
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1GC04599G	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 Nakakuki Yusuke, Hirose Takashi, Sotome Hikaru, Gao Min, Shimizu Daiki, Li Ruiji, Hasegawa Jun-ya, Miyasaka Hiroshi, Matsuda Kenji	4. 巻 13
2. 論文標題 Doubly linked chiral phenanthrene oligomers for homogeneously -extended helicenes with large effective conjugation length	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-022-29108-8	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 Takei Daisuke, Yatabe Takafumi, Yabe Tomohiro, Miyazaki Ray, Hasegawa Jun-ya, Yamaguchi Kazuya	4. 巻 2
2. 論文標題 C-H Bond Activation Mechanism by a Pd(II)( $\mu$ -O)Au(0) Structure Unique to Heterogeneous Catalysts	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JACS Au	6. 最初と最後の頁 394 ~ 406
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacsau.1c00433	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 Ueda Yusuke, Masuda Yusuke, Iwai Tomohiro, Imaeda Keisuke, Takeuchi Hiroki, Ueno Kosei, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Sawamura Masaya	4. 巻 144
2. 論文標題 Photoinduced Copper-Catalyzed Asymmetric Acylation of Allylic Phosphates with Acylsilanes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 2218 ~ 2224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.1c11526	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 Murata Takumi, Hiyoshi Mahoko, Maekawa Shinsuke, Saiki Yuta, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Ema Tadashi	4. 巻 24
2. 論文標題 Deoxygenative CO <sub>2</sub> conversions with triphenylborane and phenylsilane in the presence of secondary amines or nitrogen-containing aromatics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Green Chemistry	6. 最初と最後の頁 2385 ~ 2390
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1GC04599G	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 Nakakuki Yusuke, Hirose Takashi, Sotome Hikaru, Gao Min, Shimizu Daiki, Li Ruiji, Hasegawa Jun-ya, Miyasaka Hiroshi, Matsuda Kenji	4. 巻 13
2. 論文標題 Doubly linked chiral phenanthrene oligomers for homogeneously -extended helicenes with large effective conjugation length	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nature Communications	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) 10.1038/s41467-022-29108-8	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 Takei Daisuke, Yatabe Takafumi, Yabe Tomohiro, Miyazaki Ray, Hasegawa Jun-ya, Yamaguchi Kazuya	4. 巻 2
2. 論文標題 C-H Bond Activation Mechanism by a Pd(II)( $\mu$ -O)Au(0) Structure Unique to Heterogeneous Catalysts	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JACS Au	6. 最初と最後の頁 394 ~ 406
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacsau.1c00433	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 Ueda Yusuke, Masuda Yusuke, Iwai Tomohiro, Imaeda Keisuke, Takeuchi Hiroki, Ueno Kosei, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Sawamura Masaya	4. 巻 144
2. 論文標題 Photoinduced Copper-Catalyzed Asymmetric Acylation of Allylic Phosphates with Acylsilanes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 2218 ~ 2224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.1c11526	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, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 16
2. 論文標題 OpenMechanochem: A Python module for mechanochemical simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SoftwareX	6. 最初と最後の頁 100879 ~ 100879
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.softx.2021.100879	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 Hoshimoto Yoichi, Sakuraba Mahiro, Kinoshita Takuya, Ohbo Masaki, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Ogoshi Sensuke	4. 巻 4
2. 論文標題 A boron-transfer mechanism mediating the thermally induced revival of frustrated carbene-borane pairs from their shelf-stable adducts	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications 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) 10.1038/s42004-021-00576-1	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 Dostagir Nazmul Hasan MD, Rattanawan Rattanawalee, Gao Min, Ota Jin, Hasegawa Jun-ya, Asakura Kiyotaka, Fukouka Atsushi, Shrotri Abhijit	4. 巻 11
2. 論文標題 Co Single Atoms in ZrO <sub>2</sub> with Inherent Oxygen Vacancies for Selective Hydrogenation of CO <sub>2</sub> to CO	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 9450 ~ 9461
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.1c02041	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 Kobayashi Hirokazu, Suzuki Yusuke, Sagawa Takuya, Kuroki Kyoichi, Hasegawa Jun-ya, Fukuoka Atsushi	4. 巻 23
2. 論文標題 Impact of tensile and compressive forces on the hydrolysis of cellulose and chitin	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 15908 ~ 15916
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP01650D	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 Ding Shipeng, Husley Max J., An Hua, He Qian, Asakura Hiroyuki, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Tanaka Tsunehiro, Yan Ning	4. 巻 3
2. 論文標題 Ionic Liquid-Stabilized Single-Atom Rh Catalyst Against Leaching	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 CCS Chemistry	6. 最初と最後の頁 1814 ~ 1822
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.31635/ccschem.021.202101063	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 Wang Yuting, Maity Nabin, Zhao Liming, Kramer Maximilian, Hasegawa Jun-ya, Shichibu Yukatsu, Konishi Katsuaki, Wang Xiaoyuan, Song Zhiyi, Bando Masayoshi, Nakano Tamaki	4. 巻 50
2. 論文標題 A Triad Fluorenone Derivative Bearing Two Imidazole Groups That Switches between Three States by Base and Acid Stimuli	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1363 ~ 1367
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.210112	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 45
2. 論文標題 Design and prediction of high potent ansa-zirconocene catalyst for olefin polymerizations: combined DFT calculations and QSPR approach	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 New Journal of Chemistry	6. 最初と最後の頁 8248 ~ 8257
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1NJ00655J	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 Miyazaki Ray, Jin Xiongjie, Yoshii Daichi, Yatabe Takafumi, Yabe Tomohiro, Mizuno Noritaka, Yamaguchi Kazuya, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 11
2. 論文標題 Mechanistic study of C-H bond activation by O <sub>2</sub> on negatively charged Au clusters: , - dehydrogenation of 1-methyl-4-piperidone by supported Au catalysts	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Catalysis Science & Technology	6. 最初と最後の頁 3333 ~ 3346
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CY00178G	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 Suzuki Yusuke, Iwase Shoutaro, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Tanaka Shinji, Kitamura Masato	4. 巻 94
2. 論文標題 Mechanism of the Asymmetric Dehydrative Allylative Cyclization of Alcohols to Cyclic Ethers Catalyzed by a CpRu Complex of the Chiral Picolinic Acid-Type Ligand, Cl-Naph-PyCOOH: Is a Allyl Intermediate Present?	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 440 ~ 450
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20200228	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 Kubo Hiromu, Hirose Takashi, Nakashima Takuya, Kawai Tsuyoshi, Hasegawa Jun-ya, Matsuda Kenji	4. 巻 12
2. 論文標題 Tuning Transition Electric and Magnetic Dipole Moments: [7]Helicenes Showing Intense Circularly Polarized Luminescence	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 686 ~ 695
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c03174	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., Dordevic D.S.	4. 巻 206
2. 論文標題 A detailed analysis of the spin-crossover reaction of H <sub>2</sub> 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 Saito Kohei, Watabe Yuya, Fujihara Takashi, Takayanagi Toshiyuki, Hasegawa Jun ya	4. 巻 41
2. 論文標題 Spin inversion mechanisms in O <sub>2</sub> 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 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 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 <sub>2</sub>	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 Deng Jingyuan, Ratanasak Manussada, Sako Yuma, Tokuda Hideki, Maeda Chihiro, Hasegawa Jun-ya, Nozaki Kyoko, Ema Tadashi	4. 巻 11
2. 論文標題 Aluminum porphyrins with quaternary ammonium halides as catalysts for copolymerization of cyclohexene oxide and CO <sub>2</sub> : metal-ligand cooperative catalysis	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Science	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 -

1. 著者名 Qu Wenqiang, Wang Penglu, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Shen Zhi, Wang Qing, Li Ruomei, Zhang Dengsong	4. 巻 54
2. 論文標題 Delocalization Effect Promoted the Indoor Air Purification via Directly Unlocking the Ring-Opening Pathway of Toluene	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Environmental Science & Technology	6. 最初と最後の頁 9693 ~ 9701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.est.0c02906	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 Yasuda Shuhei, Osuga Ryota, Kunitake Yusuke, Kato Kazuya, Fukuoka Atsushi, Kobayashi Hirokazu, Gao Min, Hasegawa Jun-ya, Manabe Ryo, Shima Hisashi, Tsutsuminai Susumu, Yokoi Toshiyuki	4. 巻 3
2. 論文標題 Zeolite-supported ultra-small nickel as catalyst for selective oxidation of methane to syngas	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-020-00375-0	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 Akiyama Toshiaki, Wada Yuki, Yamada Makito, Shio Yasunori, Honma Tetsuo, Shimoda Shuhei, Tsuruta Kazuki, Tamenori Yusuke, Haneoka Hitoshi, Suzuki Takeyuki, Harada Kazuo, Tsurugi Hayato, Mashima Kazushi, Hasegawa Jun-ya, Sato Yoshihiro, Arisawa Mitsuhiro	4. 巻 22
2. 論文標題 Self-Assembled Multilayer Iron(0) Nanoparticle Catalyst for Ligand-Free Carbon-Carbon/Carbon-Nitrogen Bond-Forming Reactions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 7244 ~ 7249
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.0c02574	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 Kohei, Watabe Yuya, Miyazaki Takaaki, Takayanagi Toshiyuki, Hasegawa Jun ya	4. 巻 41
2. 論文標題 Spin inversion mechanisms in O2 binding to a model heme compound: A perspective from nonadiabatic wave packet calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 2527 ~ 2537
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26409	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, Watanabe K-jiro, Nakatani Naoki, Nakayama Akira, Xu Xin, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 153
2. 論文標題 Extending nudged elastic band method to reaction pathways involving multiple spin states	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 134114 ~ 134114
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0021923	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 Cao Ji, Tamura Masazumi, Hosaka Ryu, Nakayama Akira, Hasegawa Jun-ya, Nakagawa Yoshinao, Tomishige Keiichi	4. 巻 10
2. 論文標題 Mechanistic Study on Deoxydehydration and Hydrogenation of Methyl Glycosides to Dideoxy Sugars over a ReOx-Pd/CeO2 Catalyst	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 12040 ~ 12051
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.0c02309	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 Nishikawa Yuta, Ohtsuka Yuhki, Ogihara Hitoshi, Rattanawan Rattanawalee, Gao Min, Nakayama Akira, Hasegawa Jun-ya, Yamanaka Ichiro	4. 巻 5
2. 論文標題 Catalytic Mechanism of Liquid-Metal Indium for Direct Dehydrogenative Conversion of Methane to Higher Hydrocarbons	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 28158 ~ 28167
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c03827	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 Ng Jie Qi, Arima Hiro, Mochizuki Takuya, Toh Kohei, Matsui Kai, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Hatano Manabu, Ishihara Kazuaki	4. 巻 11
2. 論文標題 Chemoselective Transesterification of Methyl (Meth)acrylates Catalyzed by Sodium(I) or Magnesium(II) Aryloxides	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 199 ~ 207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.0c04217	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, Kobayashi Hirokazu, Fukuoka Atsushi, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 125
2. 論文標題 On the Electronic Structure Origin of Mechanochemically Induced Selectivity in Acid-Catalyzed Chitin Hydrolysis	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 187 ~ 197
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.0c09030	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 Kubo Hiromu, Hirose Takashi, Nakashima Takuya, Kawai Tsuyoshi, Hasegawa Jun-ya, Matsuda Kenji	4. 巻 12
2. 論文標題 Tuning Transition Electric and Magnetic Dipole Moments: [7]Helicenes Showing Intense Circularly Polarized Luminescence	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 686 ~ 695
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c03174	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 Suzuki Yusuke, Iwase Shoutaro, Ratanasak Manussada, Hasegawa Jun-ya, Tanaka Shinji, Kitamura Masato	4. 巻 94
2. 論文標題 Mechanism of the Asymmetric Dehydrative Allylative Cyclization of Alcohols to Cyclic Ethers Catalyzed by a CpRu Complex of the Chiral Picolinic Acid-Type Ligand, Cl-Naph-PyCOOH: Is a Allyl Intermediate Present?	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 440 ~ 450
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20200228	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 Miyazaki Ray, Jin Xiongjie, Yoshii Daichi, Yatabe Takafumi, Yabe Tomohiro, Mizuno Noritaka, Yamaguchi Kazuya, Hasegawa Jun-ya	4. 巻 -
2. 論文標題 Mechanistic study of C-H bond activation by O <sub>2</sub> on negatively charged Au clusters: , - dehydrogenation of 1-methyl-4-piperidone by supported Au catalysts	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Catalysis Science & Technology	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) 10.1039/D1CY00178G	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 -
2. 論文標題 Design and Prediction of High Potent ansa-Zirconocene for Olefin Polymerizations: Combined DFT Calculations and QSPR Approach	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 New Journal of 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) 10.1039/D1NJ00655J	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44件(うち招待講演 13件/うち国際学会 21件)

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Computational Chemistry with External Force for Investigation of Reaction Mechanisms
3. 学会等名 The Path of Quantum Chemistry into the 21st Century (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 M. Ratanasak, K. Ishihara, J. Hasegawa
2. 発表標題 Elucidating the Chemoselective Transesterification Mechanism of Novel Mg(II) and Na(I) Bisphenoxide Catalysts for Industrial Applications
3. 学会等名 The 8th Japan-Thai Workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2023 & The 8th International Workshop on Quantum Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 長谷川淳也
2. 発表標題 外力を導入した計算化学による反応機構研究
3. 学会等名 第8回FlowSTシンポジウム(招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 長谷川淳也
2. 発表標題 系間交差を経由する化学反応機構
3. 学会等名 QCRIセミナー(招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 長谷川淳也
2. 発表標題 計算化学にもとづく物性制御・反応制御
3. 学会等名 データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 大城海，高敏，長谷川淳也
2. 発表標題 酸化セリウム表面の酸素欠陥を記述する機械学習力場の構築
3. 学会等名 凝縮系の理論化学 2024
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 S. Hadsadee, M. Ratanasak, K. Asakura, H. Ogiwara, I. Yamanaka, J. Hasegawa
2. 発表標題 DFT Study of the Catalytic Active Site of Co <sub>4</sub> Cx on KB for Electroreduction of CO <sub>2</sub> to CO
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 加藤創，飯田健二，長谷川淳也
2. 発表標題 Pt単原子電極触媒を用いた酸素還元反応におけるアニオン効果についての理論的研究
3. 学会等名 第133回触媒討論会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 宮川翔, 長谷川淳也
2. 発表標題 Mechanistic Study on the Aza-Aldol Reaction of Boron Aza-Enolates
3. 学会等名 IRCCS成果報告会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Computational Chemistry with Constraint Force for Investigation of Reaction Mechanisms
3. 学会等名 The 4th Materials Research Society of Thailand International Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 D. P. De Chavez and Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 On the Electronic Structure Origin of Mechanochemically Induced Selectivity in Acid Catalyzed Chitin Hydrolysis
3. 学会等名 Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 M. Ratanasak, K. Ishihara, J. Hasegawa
2. 発表標題 Elucidating the Chemoselective Transesterification Mechanism of Green Sustainable Magnesium(II) and Sodium(I) Bisphenoxide Catalysts for Industrial Applications
3. 学会等名 The 16th Eurasia Conference on Chemical Sciences 2023 (EURASIA 2023): Frontiers in Chemical Sciences for Sustainability (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kai Oshiro, Min Gao, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical investigation of the alkali metal poisoning tolerance mechanism of CeO <sub>2</sub> containing Fe and H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> additives
3. 学会等名 MRM2023/IUMRS-ICA2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大城海, 高敏, 長谷川淳也
2. 発表標題 酸化セリウム表面の相対的安定性を記述する機械学習力場の構築
3. 学会等名 第132回触媒討論会 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kenji Iida, Hinoki Hirase, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Development of Theoretical Approach for Heterogeneous Solid-Liquid Interface Under Bias Voltage
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Sarinya Hadsadee, Manussada Ratanasak, Kenji Iida, Ichiro Yamanaka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 DFT Exploration of the Catalytic Active Site of CoN <sub>4</sub> C <sub>x</sub> on KB for Electroreduction of CO <sub>2</sub> to CO
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Manussada Ratanasak , Tadashi Ema, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanistic DFT Study of BPh3-Catalyzed N-Methylation of Amines with CO <sub>2</sub> and PhSiH <sub>3</sub>
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kai Oshiro, Min Gao, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanistic study of the alkali tolerance mechanism of H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> /Fe-CeO <sub>2</sub> catalyst for NH <sub>3</sub> -SCR
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Manussada Ratanasak , Tadashi Ema, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanistic DFT Study of BPh3-Catalyzed N-Methylation of Amines with CO <sub>2</sub> and PhSiH <sub>3</sub>
3. 学会等名 ICAT International Symposium on Catalysis 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 R. Miyazaki, R. Rattanawan, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 DFT Mechanistic Study on C-H Activation by Heterogeneous Catalysts
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Metal-support charge-transfer interaction in Au/OMS2 activates adsorbed O2 for indirect C-H activation of piperidone
3. 学会等名 The 2022 Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON 2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical study on C-H activation with heterogeneous catalysts
3. 学会等名 ICAT-IIT Indore Joint Symposium on Catalysis (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Miyazaki, X. Jin, D. Yoshii, T. Yatabe, K. Yamaguchi, J. Hasegawa
2. 発表標題 Metal-support charge-transfer interaction in Au/OMS-2 activates adsorbed O2 for indirect C-H activation of piperidone
3. 学会等名 TOCAT9 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Miyazaki, X. Jin, D. Yoshii, T. Yatabe, K. Yamaguchi, J. Hasegawa
2. 発表標題 Metal-support charge-transfer interaction in Au/OMS-2 activates adsorbed O2 for indirect C-H activation of piperidone
3. 学会等名 PACCON2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Catalyst Informatics Cooperation among Institutes in Japan
3. 学会等名 e-ASIA Joint Research Program Online Workshop on Materials Informatics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 千葉卓紘, 飯田健二, 長谷川淳也
2. 発表標題 酸化チタン表面におけるプロトン移動とその触媒への応用に関する理論的研究
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2022年冬季研究発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大城海, 高敏, 長谷川淳也
2. 発表標題 NH3-SCR反応に用いられるFe/H2SO4修飾CeO2触媒のアルカリ金属被毒耐性 メカニズムに関する理論的研究
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2022年冬季研究発表
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Manussada Ratanasak, Jie Qi Ng, Hiro Arima, Takuya Mochizuki, Kohei Toh, Kai Matsui, Manabu Hatano, Kazuaki Ishihara, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 DFT Study on the Chemoselective Transesterification of Methyl Acrylate with Benzyl Alcohol Catalyzed by Magnesium(II) Aryloxides
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 Rattanawale Rattanawan, Min Gao, Ichiro Yamanaka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanisms study on nonoxidative coupling of methane catalyzed by Nickle phosphide
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 原綾汰, 高敏, 小林広和, 福岡淳, 長谷川淳也
2. 発表標題 RhドーブCo微粒子触媒のCH4活性化に関する理論的研究
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 大城海, 高敏, 長谷川淳也
2. 発表標題 Fe/SO42-/CeO2触媒を用いたNH3-SCR法におけるアンモニア吸着過程とアルカリ金属被毒耐性に関する理論的研究
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 Rattanawale Rattanawan, 高敏, 山中 一郎, 長谷川 淳也
2. 発表標題 Direct Dehydrogenative Conversion of Methane into C2 Hydrocarbon over Nickel Phosphide Active Catalyst: Theoretical Study
3. 学会等名 第128回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大城 海、高 敏、長谷川 淳也
2. 発表標題 アルカリ被毒耐性を有する脱硝Fe/SO42-/CeO2触媒のアンモニア吸着過程に関する理論的研究
3. 学会等名 第128回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大城 海，高 敏，長谷川 淳也
2. 発表標題 Fe/SO42-/CeO2触媒を用いた NH3-SCR メカニズムに関する理論的研究
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 宮崎 玲，大野 祥平，有澤 光弘，長谷川 淳也
2. 発表標題 還元的脱離過程によって決定される触媒サイクル: Ni 錯体触媒による C-O 結合活性化を介した分子内環化反応メカニズムの理論的研究
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 千葉 卓紘，飯田 健二，長谷川 淳也
2. 発表標題 担持 Pt 触媒を用いたメタン水蒸気改質反応における電場の役割に関する理論的研究
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 Danjo De Chavez and Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Mechanical Pushing Induced Selective Cyclopropanation Reaction in Ag(111) Surface
3. 学会等名 Advanced School on Quantum Transport using Siesta Centre Europeen de Cacul Atomique et Moleculaire (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 J. Hasegawa
2. 発表標題 Catalyst Informatics Cooperation among Institutes in Japan
3. 学会等名 e-ASIA Joint Research Program Online Workshop on Materials Informatics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大城海, 高敏, 長谷川淳也
2. 発表標題 Fe / S042- / CeO2 触媒による NH3 を用いた NOx 還元反応メカニズムに関する理論的研究
3. 学会等名 第127回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 保坂龍, 中山哲, 田村正純, 中川善直, 富重圭一, 長谷川淳也
2. 発表標題 単核ReOx/CeO2触媒による脱酸素脱水反応の理論的研究
3. 学会等名 第127回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Manussada Ratanasak, Jingyuan Deng, Hideki Tokuda, Chihiro Maeda, Tadashi Ema, Kyoko Nozaki, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Exploring the Mechanism of Novel Bifunctional AIII Porphyrin Catalyzed Copolymerization of CO <sub>2</sub> and Cyclohexene Oxide: A DFT Study
3. 学会等名 The 4th IRCCS International Symposium at Hokkaido University
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kai Oshiro, Min Gao, Jun-ya Hasegawa,
2. 発表標題 Mechanistic Study on the Selective Catalytic Reduction of NO <sub>x</sub> Catalyzed by Fe/SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> /CeO <sub>2</sub> with NH <sub>3</sub>
3. 学会等名 The 4th IRCCS International Symposium at Hokkaido University
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Rattanawalee Rattanawan, Min Gao, Ichiro Yamanaka, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical investigations on C-C Coupling versus C-H Coupling on Fe-based Catalyst
3. 学会等名 第126回触媒討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ray Miyazaki, Xiongjie Jin, Daichi Yoshii, Takafumi Yatabe, Kazuya Yamaguchi, Noritaka Mizuno, Jun-ya Hasegawa
2. 発表標題 Theoretical Study of C-H Bond Activation by O <sub>2</sub> on Negatively Charged Au Cluster Catalyst
3. 学会等名 Conference on a FAIR Data Infrastructure for Materials Genomics (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

触媒理論研究部門ホームページ  
<https://www.cat.hokudai.ac.jp/hasegawa/>

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