

令和 6 年 5 月 15 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04973

研究課題名(和文)ダイレクト・アブイニシオMD法による微視的溶媒和クラスターの実時間反応追尾

研究課題名(英文)Real-time reaction dynamics of micro-solvated clusters by direct ab initio MD method

研究代表者

田地川 浩人(Tachikawa, Hiroto)

北海道大学・工学研究院・准教授

研究者番号：10207045

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：化学反応は、少数の溶媒分子の存在により大きな影響を受ける場合が多い。微視的溶媒和クラスターは、少数の溶媒分子によって取り囲まれた分子(溶質)からなり、溶質の周りの溶媒を部分的に切り出したナノスケールの溶液といえる。本研究では、ダイレクト・アブイニシオ分子動力学法を用いて、微視的溶媒和クラスター内での反応ダイナミクスを理論的に研究した。特に、光照射後の反応ダイナミクスを実時間で追尾し、反応への微視的溶媒和の効果を理論的に予測した。また、単一分子デバイスの電導性への微視的溶媒和の効果等について研究した。その結果、微視的溶媒和により反応のメカニズムが大きな影響を受けることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

微視的溶媒和クラスターは、分子が少数の溶媒分子に取り囲まれた集合体であり、いわばナノスケールの溶液といえる。最近、クラスターの大きさを選別した実験が可能となってきている。これに対し、理論的なアプローチは、有力な方法論が無いため極めて少ない。本研究で開発するダイレクト・アブイニシオ分子動力学法は、純理論的にクラスターの反応を追尾する有力な計算方法である。本研究課題では、この計算法を発展させるとともに、微視的溶媒和クラスター内での光化学反応を理論的に研究する。これにより、新しい反応を設計することが可能となり、新規の薬品、および電子材料の開発への発展が期待される。

研究成果の概要(英文)：Chemical reaction rates are greatly affected by the surrounding solvent. Microscopic solvation clusters are clusters of molecules surrounded by a small number of solvent molecules, and can be regarded as nanoscale solutions in which the solvent around the solute is partially cut out. In this research project, the direct ab-initio molecular dynamics (AIMD) method was applied to the theoretical elucidation of reaction dynamics in microscopic solvation clusters. In particular, we theoretically predicted the effect of microscopic solvation by tracking the reaction after light irradiation in real time. The results revealed that the reaction mechanism is greatly affected by microscopic solvation.

研究分野：量子化学

キーワード：理論反応設計 理論分子設計 電子捕捉反応 光誘起反応 媒質効果 プロトン移動 実時間反応追尾 イオン解離

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

化学反応は、少数の溶媒分子の存在により大きな影響を受ける場合が多い。微視的溶媒和クラスターは、少数の溶媒分子によって取り囲まれた分子(溶質)からなるクラスターであり、溶質の周りの溶媒分子を部分的に切り出した、いわばナノスケールの溶液といえる。最近、クラスターサイズを選別した微視的溶媒和クラスターを任意に生成することが可能となってきており、質量分析法およびレーザー分光法を組み合わせることによって、その反応ダイナミクスについて、詳細な実験が可能となってきている。これに対し、微視的溶媒和クラスターの反応ダイナミクスに関する理論的なアプローチは極めて少ない。従来の理論的研究のほとんどは、溶媒和構造および電子状態等の静的な情報(時間を含まない情報)に留まっており、本研究で対象とする「微視的溶媒和クラスターの実時間反応ダイナミクスの理論的説明」は、世界的にほとんど行われていない現状にある。

本研究では、研究代表者・田地川が開発したダイレクト・アブイニシオ分子動力学(AIMD: Ab-initio molecular dynamics)法を用いて、微視的溶媒和クラスター内での反応ダイナミクスを理論的に研究した。特に、照射後の反応ダイナミクスを実時間で追尾することにより、反応の詳細なメカニズムを解明し、「反応ダイナミクスへの微視的溶媒和の効果」を理論的に予測した。

### 2. 研究の目的

本研究課題では、化学反応への「微視的溶媒和の効果」をダイレクト AIMD 法を用いて、実時間で解明することを目的とした。特に、照射後の反応ダイナミクスを実時間で追尾することにより、反応の詳細なメカニズムを解明し、反応ダイナミクスへの微視的溶媒和の効果を実験的に予測した。

ダイレクト AIMD 法は、反応の時間毎に全自由度を考慮したエネルギー勾配を計算しながらトラジェクトリーを計算する方法であり、現在のところ、溶媒和クラスターのダイナミクスを全自由度で計算する唯一の方法である。実験では反応の最終生成物しか観測できないが、ダイレクト AIMD 法では、フェムト秒オーダーの実時間で追尾が可能であるため、反応中間体の構造、電子状態、および寿命等、実験からは得られない詳細な反応のメカニズムを解明できる利点を持つ。

本研究では、微視的溶媒和クラスターの動的構造を解明するとともに、(1)イオン化ダイナミクス、(2)電子捕捉ダイナミクス、および、(3)光励起反応ダイナミクスを理論的に解明した。

### 3. 研究の方法

微視的溶媒和クラスターは、化学反応への溶媒効果を解明するボトムアップ的方法として注目を浴びている反応場である。しかしながら、溶媒クラスター内に閉じ込められた分子の光によるイオン化実時間ダイナミクスについての情報は極めて限られている。これは、クラスター内のイオン化では、様々な反応チャンネルを経て反応生成物へ向かうため、実験的に、その複合的な反応過程を解析するのが困難であること、および反応が極めて高速のため実験的には生成物しか観測できない理由による。

本研究では、微視的溶媒和クラスターのイオン化(または電子捕捉)後の実時間ダイナミクスをダイレクト AIMD 法を用いて理論的に研究し、(1)反応開始直後から生成系へ至る全過程を実時間で追尾し、動的メカニズムを解明する、(2)反応チャンネルを支配している因子を解明する、および(3)これらの反応チャンネルを制御する方法の開発(どのような実験条件であれば、単一チャンネルのみを取り出せるか?)の解明を目指した。ダイレクト AIMD 法の概念図を図 1 に示す。この方法により、塩酸-水クラスター、DNA 塩基対、フェノール、一酸化炭素-水クラスター等の微視的溶媒和クラスターのイオン化に伴う反応ダイナミクスを理論的に研究した。

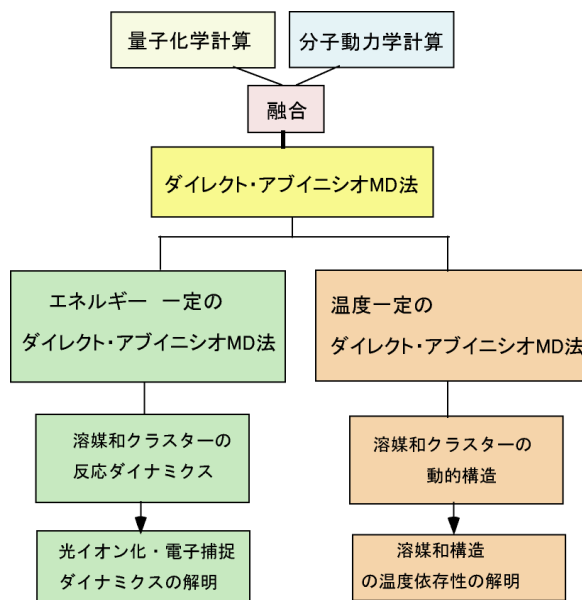


図 1. ダイレクト AIMD 法の説明と本研究の概念図。

量子化学計算と分子動力学(MD)計算を融合したハイブリッドな計算方法であり、時間依存による反応過程を追尾可能である。

塩酸-水クラスター、DNA 塩基対、フェノール、一酸化炭素-水クラスター等の微視的溶媒和クラスターのイオン化に伴う反応ダイナミクスを理論的に研究した。

#### 4. 研究成果

(1) 塩酸(HCl)は最低何個の水分子でイオン解離するか？

塩酸をはじめとする強酸が水に溶ける現象は、化学や生物学における基本的なプロセスである。本研究では、ダイレクト AIMD 法により塩酸(HCl)分子がイオン解離 ( $\text{HCl} \rightarrow \text{H}^+ + \text{Cl}^-$ ) する水分子( $\text{H}_2\text{O}$ )の最小数を決定した。計算では、HCl (1分子)を  $\text{H}_2\text{O}$  が溶媒和したクラスター  $\text{HCl}(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$  ( $n$ : 配位数)へ  $\text{H}_2\text{O}$  を衝突させ、解離反応を実時間で追尾した。計算の結果、 $n=1-3$  までは、解離反応が起きなかったが、 $n=4$  より反応が進行した。生成物として、プロトンが  $\text{H}_2\text{O}$  へ付加したヒドロニウムイオン( $\text{H}_3\text{O}^+$ )と塩素イオン( $\text{Cl}^-$ )のイオン対 (ion-pair) が生成した。反応は、 $\text{HCl}(\text{H}_2\text{O})_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_4\text{Cl}^-$  (ion-pair) と表される

図2に、イオン解離した反応のスナップショットを示す。時間ゼロで、衝突  $\text{H}_2\text{O}$  を、クラスターから、5 Å の距離に初期配置し反応をスタートさせた。260fs 後に  $\text{H}_2\text{O}$  がクラスターに衝突し、HCl から水クラスターへのプロトン移動が開始した。860fs 後には、イオン対が生成しイオン解離が終了した。4 個の水分子は、イオンを安定化する等それぞれの役割があり、最低4分子の  $\text{H}_2\text{O}$  が必要となる。

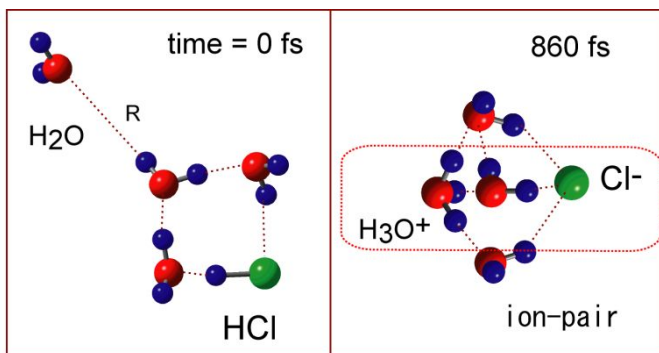


図2. ダイレクト AIMD法の応用例。塩酸(HCl)が4個の水分子でイオン解離した反応性スナップショットの一例。

[田地川: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 26, 3623-3631 (2024).]

(2) 電子材料開発への応用

水素はクリーンエネルギーである。水素エネルギーを活用するためには効率の良い水素貯蔵の材料を開発することが必要である。近年では炭素材料を用いた水素貯蔵が研究されている。先の研究で、我々のグループはグラフェンナノフレークに Li 原子をドーピングすることにより、グラフェンナノフレークの水素貯蔵能力が著しく向上することを明らかにした。しかしながら、リチウム系における水素分子の結合エネルギーは、4 kcal/mol 程度であり、効率の良い貯蔵材料を設計するためには、更に結合エネルギーの高い材料を探索する必要がある。また、水素の吸脱着機能が容易な材料を開発する必要もある。本研究では Li よりフレキシブルな多価電荷状態を取り得る Mg をドーピングし、その水素貯蔵性能を調べた。

水素分子結合エネルギーの値は  $n=1$  の場合、12.0 kcal/mol、 $n=9$  の場合、3.70 kcal/mol であり、GR-Li 系よりも大きな水素分子吸着能力を示した。Mg の電荷の違いにより水素分子の結合エネルギーが変化することから、Mg の価数を制御することで水素の着脱をコントロールできる可能性がある。以上の結果をもとに、GR-Mg 系による  $\text{H}_2$ -可逆脱着デバイスのモデルを提案した。図3に概念図を示す。GR-Mg<sup>2+</sup>-H<sub>2</sub>系では、H<sub>2</sub>は Mg<sup>2+</sup>に強く結合している(吸着)。外部より電子を注入すると、Mg<sup>+</sup>-H<sub>2</sub>間の結合が弱くなり水素が放出される(脱離)。この系にホールを注入すると、再度、H<sub>2</sub>が Mg<sup>2+</sup>へ吸着する。ダイレクト AIMD 計算の結果、これらの吸着・脱離反応の速度は、200fs の高速で起こることが計算された。このことは、GR-Mg 系は、 $\text{H}_2$ -可逆脱着デバイスとして優れた特性を持つことを示している。

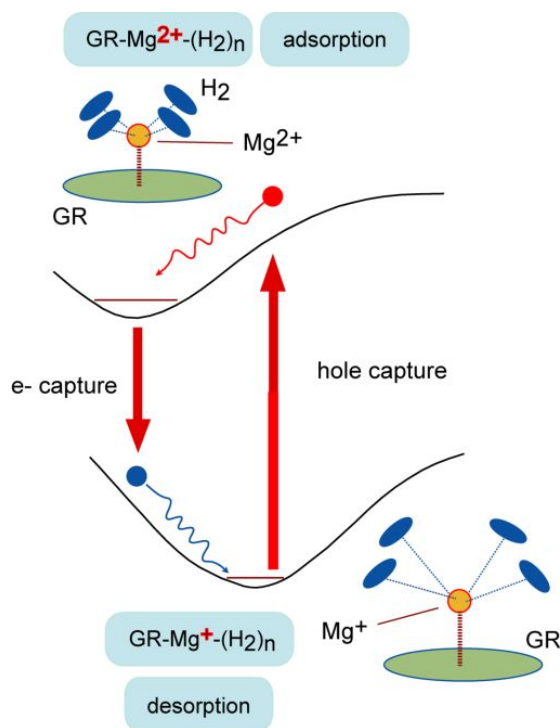


図3. ダイレクト AIMD法の電子材料開発への応用例。グラフェン・マグネシウムによる水素貯蔵系。電子、ホールの捕捉により、水素の吸着・脱離が進行する。[田地川: *ACS OMEGA*, 6, 7778-7785 (2021).]

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計22件（うち査読付論文 22件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 9件）

1. 著者名 Tachikawa Hiroto	4. 巻 126
2. 論文標題 Reaction Dynamics of NO <sup>+</sup> with Water Clusters	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 119 ~ 124
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c09461	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 126
2. 論文標題 Formation Mechanism of Odd- and Even-Numbered Hydrogen Cluster Cations Using the Direct Ab Initio Molecular Dynamics Approach	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 8225 ~ 8232
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c06355	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 Yamasaki Shuhei, Tachikawa Hiroto	4. 巻 7
2. 論文標題 Intracuster Reaction Dynamics of Ionized Micro-Hydrated Hydrogen Peroxide (H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ): A Direct Ab Initio Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 33866 ~ 33872
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c02730	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 Tachikawa Hiroto, Yi Heewon, Iyama Tetsuji, Yamasaki Shuhei, Azumi Kazuhisa	4. 巻 3
2. 論文標題 Hydrogen Storage Mechanism in Sodium-Based Graphene Nanoflakes: A Density Functional Theory Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Hydrogen	6. 最初と最後の頁 43 ~ 52
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/hydrogen3010003	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 Tachikawa Hiroto, Lund Anders	4. 巻 24
2. 論文標題 Structures and electronic states of trimer radical cations of coronene: DFT-ESR simulation study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 10318 ~ 10324
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp04638a	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 8
2. 論文標題 C-C Bond Formation Reaction Catalyzed by a Lithium Atom: Benzene-to-Biphenyl Coupling	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 10600 ~ 10606
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.3c00520	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 Kawabata Hiroshi, Tachikawa Hiroto	4. 巻 15
2. 論文標題 Effect of curvature on the activation energy of monomethylation of carbon belts: a DFT study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 101001 ~ 101001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ac8d4a	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 Kawabata Hiroshi, Tachikawa Hiroto	4. 巻 61
2. 論文標題 Dissociation mechanism of a C60-Li+ complex by microscopic hydration: density functional theory study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 071004 ~ 071004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac78b0	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 24
2. 論文標題 Reaction mechanism of an intracuster SN2 reaction induced by electron capture	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3941 ~ 3950
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp04697g	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 126
2. 論文標題 Reaction Dynamics of NO+ with Water Clusters	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 119 ~ 124
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c09461	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 Tachikawa Hiroto, Yi Heewon, Iyama Tetsuji, Yamasaki Shuhei, Azumi Kazuhisa	4. 巻 3
2. 論文標題 Hydrogen Storage Mechanism in Sodium-Based Graphene Nanoflakes: A Density Functional Theory Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Hydrogen	6. 最初と最後の頁 43 ~ 52
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/hydrogen3010003	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 Takada Tomoya, Tachikawa Hiroto	4. 巻 54
2. 論文標題 Direct ab initio molecular dynamics study on the reactions of multi-valence ionized states of water dimer	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 145103 ~ 145103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6455/ac170b	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 6
2. 論文標題 Reactions of Photoionization-Induced CO-H <sub>2</sub> O Cluster: Direct Ab Initio Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 16688 ~ 16695
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c02612	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 125
2. 論文標題 Formation of Hydrogen Peroxide from O-(H <sub>2</sub> O) <sub>n</sub> Clusters	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 4598 ~ 4605
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c02883	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 Tachikawa Hiroto, Izumi Yoshiki, Iyama Tetsuji, Azumi Kazuhisa	4. 巻 6
2. 論文標題 Molecular Design of a Reversible Hydrogen Storage Device Composed of the Graphene Nanoflake-Magnesium-H <sub>2</sub> System	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 7778 ~ 7785
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c00243	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 Takada Tomoya, Tachikawa Hiroto	4. 巻 22
2. 論文標題 Solvatochromism of 4-(diethylamino)-4'-nitroazobenzene: explanation based on CNDO/S calculation results	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computer Aided Chemistry	6. 最初と最後の頁 8 ~ 16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2751/jcac.22.8	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 Tachikawa Hiroto, Iyama Tetsuji	4. 巻 540
2. 論文標題 Hydration effects on proton transfer reactions in the catalytic triad Ser-His-Glu	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 111003 ~ 111003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2020.111003	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 Hashimoto Yu, Saito Kohei, Takayanagi Toshiyuki, Tachikawa Hiroto	4. 巻 23
2. 論文標題 Theoretical study of the dissociative photodetachment dynamics of the hydrated superoxide anion cluster	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 16958 ~ 16965
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp02379a	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 Kawabata Hiroshi, Tachikawa Hiroto	4. 巻 16
2. 論文標題 Theoretical study of the relationship between the electronic structure of carbon nanotube surface and its hydrogenation sites	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 061006 ~ 061006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/acddcb	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 Tachikawa Hiroto, Izumi Yoshiki, Iyama Tetsuji, Abe Shigeaki, Watanabe Ikuya	4. 巻 13
2. 論文標題 Aluminum-Doping Effects on the Electronic States of Graphene Nanoflake: Diffusion and Hydrogen Storage Mechanism	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nanomaterials	6. 最初と最後の頁 2046 ~ 2046
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/nano13142046	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 Abe Shigeaki, Tachikawa Hiroto, Iyama Tetsuji, Safaei Sirus, Nesabi Mahdis, Valanezhad Alireza, Watanabe Ikuya	4. 巻 63
2. 論文標題 Density functional theory study on the interaction of C60 fullerene with PCBM	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 01SP31 ~ 01SP31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ad0305	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 Tachikawa Hiroto	4. 巻 26
2. 論文標題 Mechanism of ionic dissociation of HCl in the smallest water clusters	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3623 ~ 3631
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CP05715A	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14件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 井山哲二, 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 金属ドーブ・グラフェンへの水素吸着機構の理論解明
3. 学会等名 第17回酸化グラフェンシンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroto Tachikawa, Tetsuji Iyama, Hiroshi Kawabata
2. 発表標題 Hydrogen Storage Mechanism in the Graphene Nanoflake-Lithium-H2 System
3. 学会等名 35th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroshi Kawabata, Tetsuji Iyama, Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Effect of Curvature on Radical Addition of Carbon Belt Surface using DFT
3. 学会等名 35th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 井山哲二, 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 金属ドーピンググラフェンによる水素貯蔵メカニズム: 理論的研究
3. 学会等名 第49回 有機典型元素化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroto Tachikawa, Tetsuji Iyama, Hiroshi Kawabata
2. 発表標題 Molecular design of high density hydrogen storage devices: A DFT approach
3. 学会等名 15th International Symposium on Advanced Plasma Science and its Applications for Nitrides and Nanomaterials (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hiroshi Kawabata, Tetsuji Iyama, Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Theoretical study on curvature of carbon materials and efficiency of radical addition reactions
3. 学会等名 15th International Symposium on Advanced Plasma Science and its Applications for Nitrides and Nanomaterials (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Shigeaki Abe, Ikuya Watanabe and Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Molecular Design of Organic Radical-Functionalized Graphene: Density Functional Theory (DFT) Study
3. 学会等名 35th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shigeaki Abe, Sirus Safaee, Ikuya Watanabe and Hiroto Tachikawa
2. 発表標題 Density Functional Theory (DFT) Study on the Organic Radical-Functionalized Graphene
3. 学会等名 15th International Symposium on Advanced Plasma Science and its Applications for Nitrides and Nanomaterials (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 泉善貴, 田地川浩人, 安住和久
2. 発表標題 金属ドーブグラフェンナノフレークの水素貯蔵メカニズム
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2021年冬季研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 微視的な水によるフラーレン表面にドーブしたLi+イオンの不活化
3. 学会等名 第15回酸化グラフェンシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井山哲二, 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 リチウムをドーブしたグラフェンの水素貯蔵メカニズムの理論解明
3. 学会等名 第15回酸化グラフェンシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 シリンドリカルフラレン表面のラジカル付加反応の位置依存性
3. 学会等名 第16回酸化グラフェンシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井山哲二, 川畑弘, 田地川浩人
2. 発表標題 グラフェン上への水素吸着の分子軌道計算
3. 学会等名 第16回酸化グラフェンシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高田知哉, 田地川 浩人
2. 発表標題 4-ジエチルアミノ-ニトロアゾベンゼンのソルバトクロミズム: CNDO/S法およびDFT法による解釈
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

田地川浩人 (Hiroto Tachikawa)  
<https://ionics.eng.hokudai.ac.jp/tachikawa.html>

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