

令和 6 年 6 月 11 日現在

機関番号：13701

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04991

研究課題名（和文）励起状態化学反応解析のための量子多成分系理論の確立と応用計算

研究課題名（英文）Development of multicomponent quantum mechanics methods for analyzing excited state chemical reactions

研究代表者

宇田川 太郎（Udagawa, Taro）

岐阜大学・工学部・准教授

研究者番号：70509356

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）：申請者はこれまで、水素原子核のような軽い原子核の量子揺らぎを直接取り込んだ量子多成分系理論による化学反応解析法（量子多成分系CI-NEB法）を開発し、化学反応における原子核の量子揺らぎの効果を明らかにしてきた。本研究課題では、量子多成分系理論を発展させ、原子核の量子揺らぎを取り込んだ電子励起状態計算を実現した。さらに、量子多成分系理論による化学反応解析の適用対象を拡大するため、反応経路および遷移状態を効率的に探索できるCI-NEB法の高速化にも取り組んだ。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で開発している手法は、原子核を固定された点電荷として取り扱う従来の量子化学計算手法と異なり、原子核自身の量子性を直接取り込むことができる手法である。この手法により、例えば重水素のような同位体原子の精密な取り扱いが可能になり、より実在系に近い理論計算が可能になる。申請者らはこの手法をさらに拡張し、励起状態の分子物性や化学反応に対する重水素同位体効果の理論計算による解析をも可能にした。

研究成果の概要（英文）：The applicant has previously developed a chemical reaction analysis method (Multicomponent quantum mechanics CI-NEB (MCQM_CI-NEB Method) using multicomponent quantum mechanics theory that directly incorporates quantum fluctuations of light nuclei, such as hydrogen nuclei, and has elucidated the effects of nuclear quantum fluctuations on chemical reactions. In this research project, the multicomponent quantum mechanics theory has been further developed to enable electronic excited state calculations. Additionally, to expand the applicability of MCQM_CI-NEB method, efforts have been made to accelerate the CI-NEB method, which efficiently searches for reaction pathways and transition states.

研究分野：量子化学

キーワード：原子核の量子効果 H/D同位体効果 DFT法 TD-DFT法 CI-NEB法

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

申請者は、実在系に近い理論計算を実現するため、水素原子核の量子揺らぎを直接取り込んだ多成分分子軌道法(MC_MO)法および多成分密度汎関数理論(MC_DFT 法) (両者を合わせて MC_QM 法)を開発し、様々な水素結合系中の水素/重水素同位体効果を明らかにしてきた。特に近年では MC_QM CI-NEB 法を開発し、水素原子核の量子揺らぎを含めた化学反応解析を実現した。

水素は、クリーンな次世代エネルギーとしても注目を集めており、基礎研究の価値が一層高まっている。水素原子核は最も軽い原子核であり、原子核自身の量子揺らぎが顕著である。この量子揺らぎは水素/重水素同位体効果を引き起こすだけでなく、水素移動反応やタンパク質中で見られる低障壁水素結合など様々な系で顕著であるものの、従来の理論計算で取り扱うことは難しい。近年兼松(広島大, 研究分担者)らは、複数の手法を組み合わせ重要部位のみを高精度に計算する ONIOM 法を応用した量子多成分系 ONIOM 法を開発し、光活性黄色タンパク質活性部位の水素結合構造に対して、原子核の量子揺らぎを考慮した理論計算を初めて実現した。また申請者は、量子多成分系 ONIOM-CI-NEB 法を開発し、緑色蛍光タンパク質中の基底状態プロトン移動反応について、水素原子核の量子揺らぎを含めた反応解析を実現した。しかし、生体分子についての理解を深めるために重要な、電子励起状態反応に対する量子揺らぎを含めた解析は実現していない。

2. 研究の目的

そこで本研究では、MC_QM 法を TD-DFT 法にまで拡張し、原子核の量子揺らぎを考慮した電子励起状態計算手法を開発することを目的とした。また、MC_QM CI-NEB 法を高速化し、電子励起状態における様々な系や化学反応に対する原子核の量子揺らぎの影響を解析するための新しい計算手法を確立する。

3. 研究の方法

(1) 原子核の量子揺らぎを考慮した電子励起状態計算を実現するため、今日の電子励起状態計算に広く用いられている TD-DFT 法へと MC_QM 法を拡張した。具体的には、汎用量子化学計算プログラムである Gaussian16 の TD-DFT 計算ルーチンを、MC_QM 計算のために拡張した。

(2) MC_QM CI-NEB 法による化学反応解析の高速化のため、Behn らによる凍結ストリング法を実装する。また、実装にあたり計算速度を向上させるための工夫を施す。

(3) 具体的な計算として、いくつかの励起状態プロトン移動反応について、開発した MC_QM TD-DFT 法により解析した。特に移動する水素原子核の量子効果や、H/D 同位体効果に焦点を当てた解析をおこなった。

4. 研究成果

(1) MC_QM 法の TD-DFT への拡張

本項目はプログラムの実装であるため、ここでは割愛する。具体的な成果に関しては、項目(3)の応用計算について報告する中でまとめて報告する。

(2) MC_QM 法による化学反応解析の高速化

MC_QM 法による化学反応解析の高速化のため、Behn らによる凍結ストリング法を MC_QM CI-NEB 法プログラムに実装した。オリジナルの凍結ストリング法は次のアルゴリズムで反応経路を探索する

1. 反応物と生成物を結ぶベクトル上、反応物もしくは生成物に近い位置に新しいイメージ(中間構造)を生成
2. 生成したイメージを、反応物と生成物を結ぶベクトルに対して直交する方向に向かって規定回数だけ最適化する
3. 手順2で最適化が終わったイメージどうしを結ぶベクトル上に手順1と同様あらたに2つイメージを生成し、そのベクトルに直交する方向に向かって規定回数だけ最適化する
4. 最適化が終わった2つのイメージ間の距離が閾値以下になるまで繰り返す

この凍結ストリング法に、計算精度をさらに向上させる工夫を施したものの、回転を含むような反応の遷移状態および反応経路を求めることが困難であった。そこで MC_QM 法による化学反応解析手法として、エネルギーの二次微分を用いる方法について検討した。MC_QM TD-DFT 工

エネルギーの原子核座標に対する解析的二次微分計算ルーチンは未実装であるため、(a) MC_QM TD-DFT ヘシアンを数値的二次微分により計算し利用する方法と、(b) TD-DFT ヘシアンを読み込んで計算する方法の2通りを検討した。計算には、励起状態分子内プロトン移動反応を起こす8-ヒドロキシノリン (8-HQ, 図1) を対象とし、それぞれの手法による計算時間を比較した (表1)。

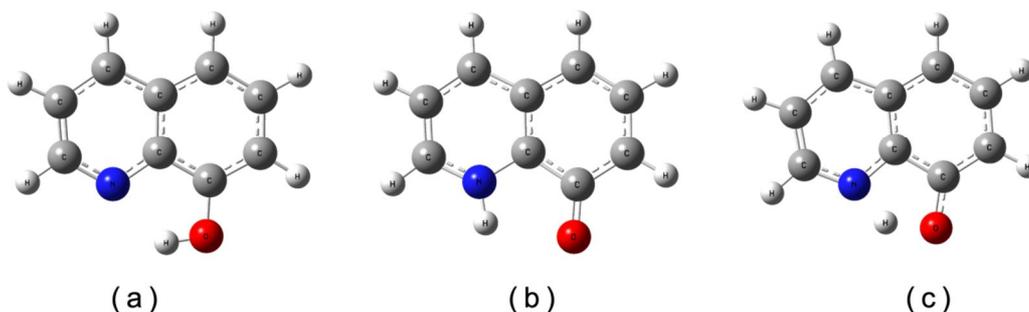


図1. 8-HQ の(a) 最安定構造, (b) プロトン移動構造, (c) 遷移状態構造

表1. 各状態の遷移状態構造計算にかかった時間

	方法	計算時間 (h)
基底状態	CI-NEB (9 images, 97 cycles)	65
	数値的二次微分	12
	解析的二次微分*1	1
励起状態	CI-NEB (9 images, 73 cycles)	514
	数値的二次微分	12
	解析的二次微分*1	1

*1 MC_QM TD-DFT エネルギーの解析的二次微分ルーチンは実装されていないため、TD-DFT エネルギーのヘシアンを利用

9つのイメージを用いたCI-NEBの計算は基底状態で97 cycles、励起状態で73 cyclesで終了した。収束に要したサイクル数はそれほど多くないものの、遷移状態構造の最適化には65時間、グラジエント計算に時間がかかる励起上来では514時間もの計算時間を要した。一方で数値的二次微分を利用する方法では計算時間は12時間と劇的に削減された。さらに、TD-DFT エネルギーのヘシアンを利用する方法では、あくまで近似ヘシアンではあるものの遷移状態構造は正常に求まり、計算時間も1時間と最も高速であった。

(3) MC_QM TD-DFT 法による化学反応解析の高速化

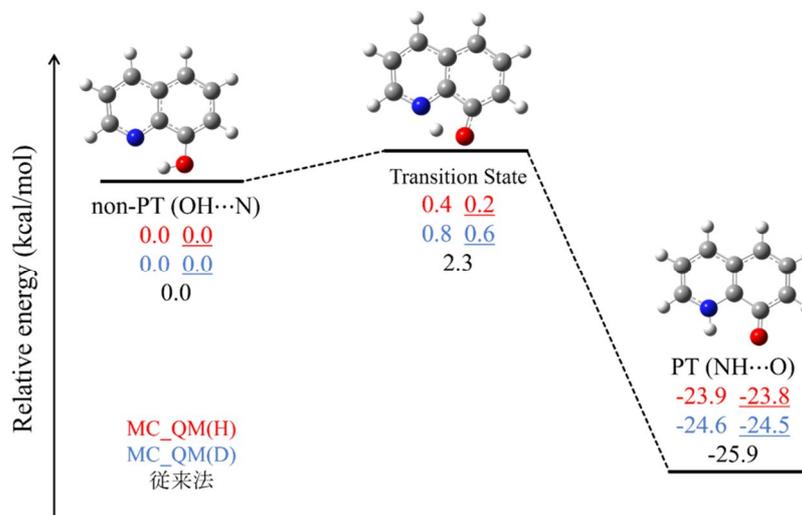


図2. 8-HQの励起状態プロトン移動エネルギープロファイル

ここでは8-HQの励起状態プロトン移動反応に関して詳細に報告する。図2に8-HQの励起状態プロトン移動反応の相対エネルギープロファイルを示した。計算には ω B97XD/6-31+G(d,p)を用いた。MC_QM TD-DFT 計算においては移動する水素原子核のみを波動関数として取り扱い、

1s ガウス型関数を原子核基底関数として用いた。原子核基底関数内に含まれる軌道指数の値 α については、先行研究で提案された値 ($\alpha_{\text{gen}}^{\text{H}} = 24.1825$, $\alpha_{\text{gen}}^{\text{D}} = 35.6214$) を用いた計算と、各化合物ごとに最適化した値 (α_{opt}) の両者を用いて計算、比較した。

この反応の基底状態におけるプロトン移動反応の活性化エネルギーは $\omega\text{B97XD/6-31+G(d,p)}$ (従来法) で 21.6 kcal/mol である。この障壁が励起状態では 2.3 kcal/mol まで減少しており、確かに励起状態で分子内プロトン移動が起きやすくなっていることがわかる。MC_QM TD-DFT 法による活性化障壁はさらに低く、0.4 (0.2) kcal/mol であった。つまり、移動する水素原子核の量子効果が活性化障壁を低下させ、プロトン移動反応を促進していることがわかった。

表 2 には TD-DFT 計算および MC_QM TD-DFT 計算により得られた、基底状態安定構造における構造パラメータの値を示した。また、表 3 は励起状態安定構造における値である。

表 2. 基底状態における安定構造の最適化された軌道指数 (α_{opt})、水素結合周りの構造パラメータ、水素原子上電荷 q_{H} .

	Non-PT (OH...N)			PT (NH...O)		
	MC_QM(H)	MC_QM(D)	従来法	MC_QM(H)	MC_QM(D)	従来法
α_{opt}	22.91	33.89		22.50	33.45	
R_{OH} [Å]	0.997	0.990	0.972	1.963	1.988	2.050
R_{NH} [Å]	2.058	2.067	2.100	1.064	1.054	1.031
R_{ON} [Å]	2.666	2.669	2.682	2.576	2.584	2.605
q_{H}	0.566	0.557	0.534	0.530	0.521	0.496

表 2. 励起状態における安定構造の最適化された軌道指数 (α_{opt})、水素結合周りの構造パラメータ、水素原子上電荷 q_{H} .

	Non-PT (OH...N)			PT (NH...O)		
	MC_QM(H)	MC_QM(D)	従来法	MC_QM(H)	MC_QM(D)	従来法
α_{opt}	21.10	31.77		23.59	34.94	
R_{OH} [Å]	1.051	1.031	0.998	2.272	2.279	2.295
R_{NH} [Å]	1.717	1.771	1.865	1.032	1.025	1.009
R_{ON} [Å]	2.489	2.512	2.551	2.691	2.693	2.698
q_{H}	0.585	0.578	0.558	0.509	0.499	0.475

この反応は先に示した通り、基底状態ではプロトン移動が起こりづらいのに対し、励起状態では容易に進行する。水素結合距離に着目してみると、non-PT の水素結合距離 R_{NH} は基底状態では 2.058 ~ 2.100 Å であるのに対し、励起状態では 1.717 ~ 1.865 Å となっており、電子励起により水素結合が短く、強くなっていることが示唆されている。原子核波動関数の広がりを表すパラメータである軌道指数も基底状態よりも励起状態において小さくなっていた。これは励起状態で分子内水素結合が強まった結果、正電荷を帯びている水素原子核波動関数がプロトンアクセプターの窒素原子とより強く相互作用し引っ張られているためであると考えれば理解できる。また、MC_QM(H), MC_QM(D), 従来法の水素結合距離を比較しても、どの状態においても MC_QM(H)において水素結合距離が最も短くなっており、原子核の量子効果により分子内水素結合がさらに強められていることがわかった。その結果、励起状態において分子内プロトン移動が促進され、さらに MC_QM(H)では原子核の量子効果も加わり、最も活性化障壁が低くなったのだと考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 1件）

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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	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 Itoga Moeko, Yamanishi Masako, Udagawa Taro, Kobayashi Ayane, Maekawa Keiko, Takemoto Yoshiji, Naka Hiroshi	4. 巻 13
2. 論文標題 Iridium-catalyzed α -selective deuteration of alcohols	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 8744 ~ 8751
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2SC01805E	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 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 Udagawa Taro, Murphy Rhys B., Darwish Tamim A., Tachikawa Masanori, Mori Seiji	4. 巻 94
2. 論文標題 H/D Isotope Effects in Keto-Enol Tautomerism of α -Dicarbonyl Compounds ?Importance of Nuclear Quantum Effects of Hydrogen Nuclei?	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 1954 ~ 1962
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20210083	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 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 Udagawa Taro, Yabushita Hinata, Tanaka Hikaru, Kuwahata Kazuaki, Tachikawa Masanori	4. 巻 25
2. 論文標題 Nuclear quantum and H/D isotope effects on intramolecular hydrogen bond in curcumin	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 15798 ~ 15806
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3cp01821k	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, Kuwahata Kazuaki, Tachikawa Masanori	4. 巻 128
2. 論文標題 Location of the Shared Proton in Proton-Bound Dimer Compound of Hydrogen Sulfate and Formate: Path Integral Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 2103 ~ 2110
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.4c00239	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, Shibata Haruya, Tachikawa Masanori	4. 巻 581
2. 論文標題 Significant nuclear quantum effect of proton in the reaction of phenol and hydroxyl radical	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 112258 ~ 112258
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2024.112258	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30件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 宇田川太郎、田中輝、平野恒夫、桑畑和明、立川仁典、馬場正昭、長嶋雲兵
2. 発表標題 ベンゼンおよびベンゼン-d6で観測されるほぼ等しいC-H/C-D結合長に関する経路積分分子動力学法を用いた直接的な考察
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田中輝、桑畑和明、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 経路積分分子動力学法を用いた芳香族性に対する量子効果の解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022年春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Taro Udagawa, Hikaru Tanaka, Kazuaki Kuwahata, Masaaki Baba, Tsuneo Hirano, Umpei Nagashima, Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Direct elucidation of the reason for almost the same bond lengths for C-H and C-D bonds in C ₆ H ₆ and C ₆ D ₆ : a path integral molecular dynamics study
3. 学会等名 75th International Symposium on Molecular Spectroscopy (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Taro Udagawa, Rhys B. Murphy, Tamim A. Darwish, Masanori Tachikawa, Seiji Mori
2. 発表標題 H/D isotope effects in keto-enol tautomerism of α -dicarbonyl compounds -Importance of nuclear quantum effects of hydrogen nuclei-
3. 学会等名 25th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宇田川太郎
2. 発表標題 ベンゼンおよびベンゼン-d ₆ で観測されるほぼ等しいC-H/C-D結合長に対する経路積分分子動力学シミュレーションによる考察
3. 学会等名 冷却分子・精密分光シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宇田川太郎、木下天音、桑畑和明、立川仁典
2. 発表標題 原子核の量子効果を考慮したNH ₄ +...XH ₂ (X = Be or Mg)二水素結合クラスターの解析
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田中輝、桑畑和明、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 経路積分分子動力学法を用いた芳香族性に対する量子効果の解析
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 平野恒夫、宇田川太郎、田中輝、桑畑和明、立川仁典、長嶋雲兵、馬場正昭
2. 発表標題 ベンゼンの振動平均構造：計算分子分光学からの提言
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Taro Udagawa, Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Nuclear quantum effects in various hydrogen-bonded systems: Multi-component quantum mechanics and path integral molecular dynamics studies
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry Kota Kinabalu (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Taro Udagawa
2. 発表標題 A path integral molecular dynamics study for C ₆ H ₆ and C ₆ D ₆ : why were the same C-H and C-D bond lengths observed in experiment?
3. 学会等名 7th International Symposium of Quantum Beam Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Taro Udagawa
2. 発表標題 A path integral molecular dynamics study for C ₆ H ₆ and C ₆ D ₆ : why were the same C-H and C-D bond lengths observed in experiment?
3. 学会等名 7th Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田中輝、藪下ひなた、桑畑和明、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 経路積分分子動力学法を用いたCurcuminの分子内水素結合構造に関する理論的研究
3. 学会等名 日本化学会第103回春季年会2023 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 江坂幸宏、前田大樹、高須蒼生、山本拓平、宇田川太郎、澤間善成
2. 発表標題 キャピラリー電気泳動法を用いた重水素による分子物性変化の観察
3. 学会等名 日本薬学会第143年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 森聖治、宇田川太郎、立川仁典
2. 発表標題 軽水素含有有機化合物と重水素含有有機化合物の挙動の違いに関する理論的研究
3. 学会等名 トリチウム研究会 2021
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 田中輝、桑畑和明、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 経路積分分子動力学法を用いたFujikurin D中の分子内水素結合構造に関する理論的解析
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 柴田晴矢、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 改良Freezing String法を用いた遷移状態構造探索の高速化
3. 学会等名 第11回CSJ化学フェスタ
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 分子内プロトン移動反応に対する水素原子核の量子効果とH/D同位体効果の理論的解析
3. 学会等名 第11回CSJ化学フェスタ
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中輝、桑畑和明、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 経路積分分子動力学法を用いたカチオン化したサリチルアルデヒドの分子内水素結合構造に関する理論的解析
3. 学会等名 第52回中部化学関係学協会支部連合秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中輝、桑畑和明、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 経路積分分子動力学法を用いたFujikurin A-D中の分子内水素結合構造に関する理論的解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2021年秋季年会inつくば
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Nuttapon Yodsin, Hiroki Sakagami, Taro Udagawa, Takayoshi Ishimoto, Siriporn Jungsutiwong, Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Metal-doped carbon nanocones as highly efficient catalysts for hydrogen storage: nuclear quantum effect on hydrogen spillover mechanism
3. 学会等名 6th Japan-Thai Online-Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中輝、桑畑和明、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 経路積分分子動力学法を用いたCurcuminの分子内水素結合構造に関する理論的研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 辻美恵子、西村友芙、小磯信幸、宇田川太郎、平山祐、永澤秀子
2. 発表標題 光ケージドペルオキシドの設計・合成とその光物性の解明
3. 学会等名 日本ケミカルバイオロジー学会第17回年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Taro Udagawa, Haruya Shibata, Masanori Tachikawa
2. 発表標題 DFT study on the nuclear quantum effect in the reaction between phenol and hydroxyl radical
3. 学会等名 TACC2023 in Sapporo (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hikaru Tanaka, Kazuaki Kuwahata, Masanori Tachikawa, Taro Udagawa
2. 発表標題 Nuclear quantum effect on aromaticity: A path integral molecular dynamics study
3. 学会等名 TACC 2023 in Sapporo (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 田中輝、桑畑和明、立川仁典、宇田川太郎
2. 発表標題 直線分子の振動平均構造に関する経路積分分子動力学シミュレーションによる考察
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宇田川太郎、柴田晴矢、立川仁典
2. 発表標題 フェノールとOHラジカルによるプロトン移動反応に対する原子核の量子効果の解析
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Taro Udagawa, Hinata Yabushita, Hikaru Tanaka, Kazuaki Kuwahata, Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Nuclear quantum effects on intramolecular low-barrier hydrogen bond in curcumin
3. 学会等名 8th International Workshop on Quantum Chemistry, 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宇田川太郎、立川仁典
2. 発表標題 重水素同位体効果を取り扱うための新規量子化学計算手法の開発と応用
3. 学会等名 第10回CBI学会個別化医療研究会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 狩谷拓実、長谷川颯人、宇田川太郎、辻美恵子、伊奈田悠作、永野真吾、加藤直樹、錫谷達夫、平山祐、永澤秀子
2. 発表標題 生理活性作用を有するデカリン生成のための化学的および酵素的分子内Diels-Alder環化付加反応の立体制御機構の解明
3. 学会等名 日本薬学会第144年会
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

岐阜大学工学部化学・生命工学科 瀧川・宇田川研究室
<https://www1.gifu-u.ac.jp/~kulab/>

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 (Kanematsu Yusuke) (10765936)	広島大学・先進理工系科学研究科(工)・助教 (15401)	

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