

Title	自動反応経路探索を用いるハイブリッド触媒系の機構解明と反応性決定因子の抽出
Sub Title	Elucidation of mechanism and etraction of key for hybrid catalytic systems based on the automated reaction path search method
Author	畑中, 美穂(Hatanaka, Miho) Sameera, W.M.C.() 諸熊, 奎治(Morokuma, Keiji)
Publisher	
Publication year	2022
Jtitle	科学研究費補助金研究成果報告書 (2021.)
JaLC DOI	
Abstract	本新学術領域研究のグループ内で開発された様々なハイブリッド触媒系の反応機構を明らかにすることで、ハイブリッド触媒反応の理解の深化や設計指針の構築を目指した。反応機構の解析には、反応経路自動探索の一つである人工力誘起反応(AFIR)法を用いた。その結果、①金属×金属型のハイブリッド触媒系には、金属が複数存在することで、反応物と相互作用可能な点が増えるという利点が、②金属×有機分子型の場合は、有機触媒だけでは制御しきれない反応物の配向を金属で補えるという利点が、③有機分子×有機分子型では、構造の自由度が高くなることで、複雑な立体制御が可能になるという利点があることが分かった。 We aimed to deepen our understanding of catalytic reactions and establish the reaction design by clarifying the reaction mechanism of various hybrid catalytic systems developed within our research project on innovative areas. To analyze the reaction mechanism, we used the artificial force-induced reaction (AFIR) method, one of the automatic reaction path search methods. In the case of metal-metal hybrid catalytic systems, multiple metals had the advantage of broadening the area that interacts or activates reactants. The advantage of the metal-organic hybrid catalytic systems is that the metal could help organocatalysts control the orientation of reactants. For the organic-organic hybrid catalytic systems, the greater degree of freedom in the structure of the catalysts allows for complex steric control.
Notes	研究種目：新学術領域研究 (研究領域提案型) 研究期間：2017～2021 課題番号：17H06445 研究分野：理論化学
Genre	Research Paper
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KAKEN_17H06445seika

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the Keio Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

令和 4 年 6 月 9 日現在

機関番号：32612

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2017～2021

課題番号：17H06445

研究課題名（和文）自動反応経路探索を用いるハイブリッド触媒系の機構解明と反応性決定因子の抽出

研究課題名（英文）Elucidation of mechanism and extraction of key for hybrid catalytic systems based on the automated reaction path search method

研究代表者

畑中 美穂（Hatanaka, Miho）

慶應義塾大学・理工学部（矢上）・准教授

研究者番号：80616011

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 35,700,000 円

研究成果の概要（和文）：本新学術領域研究のグループ内で開発された様々なハイブリッド触媒系の反応機構を明らかにすることで、ハイブリッド触媒反応の理解の深化や設計指針の構築を目指した。反応機構の解析には、反応経路自動探索の一つである人工力誘起反応（AFIR）法を用いた。その結果、金属×金属型のハイブリッド触媒系には、金属が複数存在することで、反応物と相互作用可能な点が増えるという利点があり、金属×有機分子型の場合は、有機触媒だけでは制御しきれない反応物の配向を金属で補えるという利点があり、有機分子×有機分子型では、構造の自由度が高くなることで、複雑な立体制御が可能になるという利点があることが分かった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまで、複数の触媒を用いる反応のメカニズムはほとんど明らかになっていなかったため、反応の合理的な設計は非常に困難であった。本研究では、様々なハイブリッド触媒系のメカニズムを明らかにすることで、各触媒の役割を明確にすることができた。本研究で解析した反応は、いずれも触媒同士の精密な制御が不可欠であるため、この情報を元により良い触媒系の設計指針の構築には至っていないが、今後同様の研究を続け、知見を蓄積していくことで、複雑な触媒系の合理的設計が可能になると期待できる。

研究成果の概要（英文）：We aimed to deepen our understanding of catalytic reactions and establish the reaction design by clarifying the reaction mechanism of various hybrid catalytic systems developed within our research project on innovative areas. To analyze the reaction mechanism, we used the artificial force-induced reaction (AFIR) method, one of the automatic reaction path search methods. In the case of metal-metal hybrid catalytic systems, multiple metals had the advantage of broadening the area that interacts or activates reactants. The advantage of the metal-organic hybrid catalytic systems is that the metal could help organocatalysts control the orientation of reactants. For the organic-organic hybrid catalytic systems, the greater degree of freedom in the structure of the catalysts allows for complex steric control.

研究分野：理論化学

キーワード：反応経路自動探索 人工力誘起反応法

1. 研究開始当初の背景

計算化学は、化学反応の中間体・遷移状態の構造や安定性を明らかにできるため、反応の理解の深化に大きく貢献してきた。しかし、従来の計算化学では、決め打ちの反応座標に沿った解析を行っていたため、複雑な反応系への適用は困難であった。この探索を自動化したのが反応経路自動探索(GRRM)である。中でも、人工力誘起反応(AFIR)法(図1)は、反応に関わる原子群を指定するだけで、様々な生成物に至る経路を自動的に探索することを可能にした方法であり、触媒反応、酵素反応、表面反応、光反応など、様々な反応系の解析に応用されている。この方法の最大の利点は、反応前の分子構造の情報さえあれば、遷移状態や中間体を比較的簡単に得ることができることである。この方法を駆使することで、様々な反応の解析が従来よりも容易になった。しかし、ハイブリッド触媒系をはじめとする複雑な反応系の場合、反応経路を決め打ちせず網羅的に探索しようとする、電子状態の計算に時間がかかるため、膨大な計算コストと時間がかかる。そのため、電子状態計算の精度と反応経路の探索範囲の広さがトレードオフの関係になっているのが現状であった。

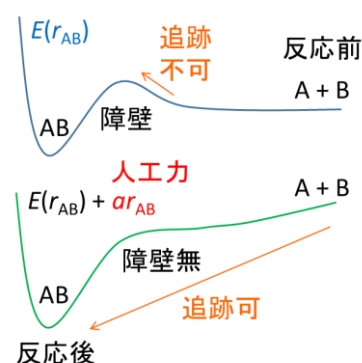


図1：人工力誘起反応法概念図

2. 研究の目的

本研究では、GRRM を駆使することで、本新学術領域研究のグループ内で開発されたハイブリッド触媒反応の機構を明らかにすることを目的とした。(機構解析を行った反応は次の通り：光学活性な銅触媒を用いるアレンの合成(金井 G)、アルコールの触媒的リン酸化(金井 G)、有機触媒を用いるアジリジンとオキシインドールの不斉開環アルキル化(大井 G)、光学活性なカリウム塩を触媒とする不斉マンニッヒ反応(山下 G)、スピロビフルオレンの鈴木・宮浦カップリングによる湾曲したパラフェニル構造の合成(鷹巣 G)、パラジウム触媒を用いる分子内環化反応(新谷 G)、不斉相間移動触媒を用いる不斉アミノ化・不斉アルキニル化(丸岡 G)。)また、様々なハイブリッド触媒系の解析を通して、計算精度を保ちつつ、重要な反応経路の探索範囲が狭まらないようにするための計算戦略の構築を目指した。さらに、得られた大量の反応経路の情報から、反応性や選択性を決める因子を抽出する戦略の構築も目指した。

3. 研究の方法

構造の自由度が高い系については、半経験的量子化学計算法(xTB 法)を用いた構造探索を行い、得られた構造をより高精度な方法(DFT 法や ONIOM 法)を用いて再度最適化した。(注：xTB 法を用いて最適化した遷移状態や中間体構造を元に議論を進めることも考えたが、高精度計算で得た構造と(特に遷移状態が)大きく異なっていたため、全て高精度な方法で再最適化した。)コンフォメーションを探索する際は、系内の原子ペアをランダムに選び、その間に人工力をかける SC-AFIR 法を用いた。得られたコンフォーマーのうち、安定なもののみ取り出し、それらの構造と反応物の間に人工力をかけることで反応経路(近似遷移状態・近似中間体構造)を探索した。遷移状態や中間体が多数得られた場合は、各構造を結合距離ベクトルで表し、教師なし学習を用いたクラスタリングや、エネルギーを目的変数とする回帰モデルを作成することで、解析において注目すべき構造パラメータを抽出した。

4. 研究成果

本新学術領域内での共同研究として反応機構解析に取り組んだ系のうち、異なるタイプのハイブリッド触媒系(金属×金属のハイブリッド触媒系、有機分子×金属のハイブリッド触媒系、有機分子×有機分子のハイブリッド系)の機構について簡単に述べる。

(1) 金属×金属のハイブリッド触媒系

・カリウム塩を触媒に用いる不斉マンニッヒ反応

カリウムヘキサメチルジシラジドと光学活性なビスオキサゾリンのカリウム塩を触媒とするイミンとアミドのマンニッヒ反応では、配位子に対してカリウムカチオンが二等量あることで、はじめて高い立体選択性が発現することが実験的に確認されていた。そこで、本触媒系の触媒活性種や立体選択性を決める過程(C-C 結合形成過程)の遷移状態を、AFIR 法を用いて網羅的に探

索したところ、図2に示すようにビスオキサゾリン配位子をカリウムカチオンが両側から挟み込むような構造が安定に存在することが分かった。次に、遷移状態の網羅探索を行うために、図2の最安定活性種を含む複数のコンフォーマーに対して、イミンをランダムな方向から接近させた AFIR 計算を行い、約 1000 種の反応経路を得た。得られた経路上のエネルギー極大点（近似遷移状態）の構造と安定性の特徴を調べるべく、エネルギーを目的変数、原子間距離ベクトルを説明変数とする Random Forest 回帰モデルを構築したところ、ビスオキサゾリン配位子とイミンの距離や、カリウムカチオンとイミンのメトキシ基の距離が、大きな寄与を持つことが分かった。近似遷移状態のうち、安定な構造を DFT レベルで最適化したところ、最安定遷移状態では、二つのカリウムカチオンが、アミドを活性化すること、イミンのメトキシ基とのイオン結合による安定化が立体選択性を決める鍵になっていることが分かった。このイオン結合は、カリウムとビスオキサゾリン配位子が 1 : 1 で錯形成する系では取り得ない構造であるため、カリウムが二等量存在することで反応中心が広がり、はじめて立体選択性が発現したと言える。

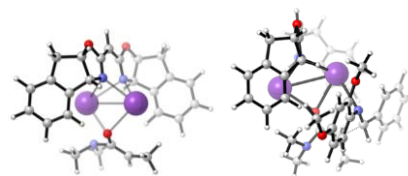


図2：光学活性なカリウム塩を触媒とする不斉マンニッヒ反応の触媒活性種と遷移状態構造

(2) 有機分子×金属のハイブリッド触媒系

・不斉相間移動触媒と酢酸銀を用いる不斉アルキニル化反応
イサチン誘導体のアルキニル化において、不斉相間移動触媒（丸岡触媒）と酢酸銀を触媒量用いることで、高収率、高立体選択的に対応する生成物を得ることができていることが報告されている。本研究では、不斉相間移動触媒と酢酸銀がどのように協働するのか理論的に明らかにすべく、反応経路の網羅探索を行った。AFIR法による近似反応経路の探索には xTB 法を用い、得られた構造を ONIOM(B3LYP-D3/UFF)法によって最適化した。その結果、不斉相間移動触媒が水素結合を介してイサチン誘導体のカルボニルを活性化すること、触媒のかさ高い置換基がイサチンの接近方向を制御すること、酢酸銀が配位結合を介してイサチン誘導体の配向を制御することがわかった。

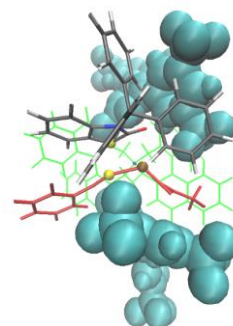


図3：不斉相間触媒と酢酸銀を用いるイサチン誘導体のアルキニル化反応の遷移状態

(3) 有機分子×有機分子のハイブリッド触媒系

・有機触媒を用いるアジリジンとオキシインドールの不斉開環アルキル化
大井らは、不斉トリアゾリウム塩を触媒に用いることで、アジリジン誘導体とオキシインドール誘導体の不斉開環アルキル化反応によって、不斉四級炭素の高収率、高立体選択的な構築を達成している。この反応では、触媒と生成物の鏡像体過剰率の間に非線形現象が観測されたことから、触媒二分子以上が反応に関与することが示唆されているが、詳細は明らかにされていない。そこで、アジリジンとオキシインドールそれぞれに対して触媒と会合した構造を探索した上で、会合体間の反応経路の探索を行った。DFT 法による反応経路探索は、計算コストが非常に高いため、以下の手順で行った。まず、側鎖を H 原子で置換したモデル触媒系の遷移状態を求めることで、反応中心の構造パラメタ（開環とアルキル化に関わる原子間距離）を調べた。次に、実在系に対して、反応中心の距離を固定し、SC-AFIR 法を用いて、xTB レベルでのコンフォメーションの網羅探索を行った。その結果、オキシインドール側の触媒①は、カルボニルの活性化とオキシインドールに対する接近方向の制御の役割を、アジリジン側の触媒②は開環によって不安定化したアジリジンの N を安定化する役割を果たしていることが分かった。また、触媒①②の間で π - π 相互作用を形成することで、系全体の安定化が起きていることが分かった（図4）。

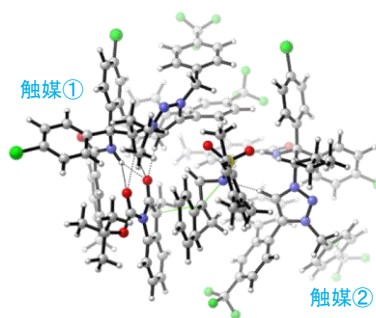


図4：アジリジンとオキシインドールの不斉開環アルキル化の遷移状態

(4) 機械学習による重要な因子の抽出

カリウム塩を触媒に用いる不斉マンニッヒ反応の解析で述べた通り、（近似）遷移状態のエネルギーを説明変数、構造パラメタを目的変数とする回帰モデルを構築することで、安定化に寄与する因子を抽出することができた。しかし、ここで抽出できる因子は全近似遷移状態の安定性を説明する「大局的な因子」であり、最安定構造と二番目に安定な構造のエネルギー差の原因を抽出しているわけではない。一般に立体選択性は、異なる立体を与える最安定遷移状態のエネルギー差で決まるため、立体選択性を決める因子の解析には、機械学習に頼らず、一つ一つの構造を調べるのが不可欠であると言える。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計32件（うち査読付論文 29件／うち国際共著 2件／うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Yamashita Yasuhiro, Noguchi Aika, Fushimi Seiya, Hatanaka Miho, Kobayashi Shu	4. 巻 143
2. 論文標題 Chiral Metal Salts as Ligands for Catalytic Asymmetric Mannich Reactions with Simple Amides	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 5598 ~ 5605
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.0c13317	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 Takayoshi Yoshimura, Maneeporn Puripat, Vudhichai Parasuk, Miho Hatanaka	4. 巻 103
2. 論文標題 Stereoselectivity of the Biginelli Reaction Catalyzed by Chiral Primary Amine: A Computational Study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Heterocycles	6. 最初と最後の頁 893 ~ 901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3987/COM-20-S(K)55	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 Takeda Youhei, Sameera W. M. C., Minakata Satoshi	4. 巻 53
2. 論文標題 Palladium-Catalyzed Regioselective and Stereospecific Ring-Opening Cross-Coupling of Aziridines: Experimental and Computational Studies	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Accounts of Chemical Research	6. 最初と最後の頁 1686 ~ 1702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.accounts.0c00395	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 Ohki Yasuhiro, Ishihara Kodai, Yaoi Moeko, Tada Mizuki, Sameera W. M. C., Cramer Roger E.	4. 巻 56
2. 論文標題 A dinuclear Mo ₂ H ₈ complex supported by bulky C ₅ H ₂ tBu ₃ ligands	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 8035 ~ 8038
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CC03274C	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 Ishihara Kodai, Araki Yuna, Tada Mizuki, Takayama Tsutomu, Sakai Yoichi, Sameera W. M. C., Ohki Yasuhiro	4. 巻 26
2. 論文標題 Synthesis of Dinuclear Mo-Fe Hydride Complexes and Catalytic Silylation of N ₂	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 9537 ~ 9546
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202000104	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 Takeda Youhei, Toyoda Kazuya, Sameera W. M. C., Tohnai Norimitsu, Minakata Satoshi	4. 巻 363
2. 論文標題 Palladium - Catalyzed Regioselective and Stereospecific Ring - Opening Suzuki - Miyaura Arylative Cross - Coupling of 2 - Arylazetidines with Arylboronic Acids	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Synthesis & Catalysis	6. 最初と最後の頁 2796 ~ 2805
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adsc.202100195	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 Domon K., Puripat M., Fujiyoshi K., Hatanaka M., Kawashima S. A., Yamatsugu K., Kanai M.	4. 巻 6
2. 論文標題 Catalytic Chemoselective O-Phosphorylation of Alcohols	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Central Science	6. 最初と最後の頁 283 ~ 292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscentsci.9b01272	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 Aoki Shin, Kikuchi Chiharu, Kitagawa Yuichi, Hasegawa Yasuchika, Sonoike Shotaro, Saga Yutaka, Hatanaka Miho	4. 巻 2019
2. 論文標題 Evaluation of Zn ²⁺ Coordination Structures in Chiral Zn ²⁺ Complexes Based on Shape Measurement Factors: Relationships between Activity and the Coordination Structure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 European Journal of Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 4740 ~ 4751
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejic.201900934	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 Aya, Hatanaka Miho	4. 巻 11
2. 論文標題 The Origins of the Stereoselectivity and Enantioswitch in the Rare - Earth - Catalyzed Michael Addition: A Computational Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemCatChem	6. 最初と最後の頁 4036 ~ 4042
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201900555	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 Kurosaki Ryo, Hayashi Hironobu, Suzuki Mitsuharu, Jiang Julong, Hatanaka Miho, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 10
2. 論文標題 A remarkably strained cyclopyrenylene trimer that undergoes metal-free direct oxygen insertion into the biaryl C-C σ -bond	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 6785 ~ 6790
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc01777a	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 Ogata Shuhei, Komiya Hiroaki, Goto Naoto, Tanabe Ryota, Sugimoto Kunihisa, Kawaguchi Shogo, Goto Kenta, Hatanaka Miho, Ishii Ayumi, Hasegawa Miki	4. 巻 48
2. 論文標題 Strong Luminescent Europium Complexes Induced by the Unprecedented Anti-chelate Effect of Acyl Groups on a N6-Hexadentate Ligand	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 593 ~ 596
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.190140	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 Sata R., Suzuki H., Ueno N., Morisawa Y., Hatanaka M., Wakabayashia T.	4. 巻 32
2. 論文標題 UV-polarizing linear polyyne molecules aligned in PVA	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chinese Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 175 ~ 181
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1674-0068/cjcp1812273	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 Endo Asuka、Hatanaka Miho、Ueno Nami、Morisawa Yusuke、Wakabayashi Tomonari	4. 巻 45
2. 論文標題 Bi2Ne: Weakly bound cluster of diatomic bismuth with neon	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Low Temperature Physics	6. 最初と最後の頁 689 ~ 696
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5111288	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 Harabuchi Yu、Hatanaka Miho、Maeda Satoshi	4. 巻 2
2. 論文標題 Exploring approximate geometries of minimum energy conical intersections by TDDFT calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters: X	6. 最初と最後の頁 100007 ~ 100007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpletx.2019.100007	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 Ishihara Kodai、Araki Yuna、Tada Mizuki、Takayama Tsutomu、Sakai Yoichi、Sameera W. M. C.、Ohki Yasuhiro	4. 巻 -
2. 論文標題 Synthesis of Dinuclear Mo - Fe Hydride Complexes and Catalytic-Silylation of N2	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry: A European 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/chem.202000104	査読の有無 無
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 Takeda Youhei、Matsuno Tetsuya、Sharma Akhilesh K.、Sameera W. M. C.、Minakata Satoshi	4. 巻 25
2. 論文標題 Asymmetric Synthesis of β 2 - Aryl Amino Acids through Pd - Catalyzed Enantiospecific and Regioselective Ring - Opening Suzuki-Miyaura Arylation of Aziridine - 2 - carboxylates	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry: A European Journal	6. 最初と最後の頁 10226 ~ 10231
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201902009	査読の有無 無
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 Furukawa Shunsuke, Fujita Masahiro, Kanatomi Yoshihiko, Minoura Mao, Hatanaka Miho, Morokuma Keiji, Ishimura Kazuya, Saito Masaichi	4. 巻 1
2. 論文標題 Double aromaticity arising from σ - and π -rings	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 60
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-018-0057-4	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 Ogata Shuhei, Goto Naoto, Sakurai Shoya, Ishii Ayumi, Hatanaka Miho, Yoshihara Koushi, Tanabe Ryota, Kayano Kyosuke, Magaribuchi Ryo, Goto Kenta, Hasegawa Miki	4. 巻 47
2. 論文標題 Alkyl chain elongation and acyl group effects in a series of Eu/Tb complexes with hexadentate π -electronic skeletons and their enhanced luminescence in solutions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 7135 ~ 7143
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7DT04899H	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 畑中 美穂	4. 巻 36
2. 論文標題 データ数が少ない系における マテリアルズ・インフォマティクス技術の効率的活用を目指して	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 日本化学会情報化学部会誌	6. 最初と最後の頁 2 ~ 4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11546/cicsj.36.2	査読の有無 無
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 Hatanaka Miho, Wakabayashi Tomonari	4. 巻 40
2. 論文標題 Theoretical study of lanthanide - based in vivo luminescent probes for detecting hydrogen peroxide	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 500 ~ 506
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25737	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 Wei Xiao-Feng, Wakaki Takayuki, Itoh Taisuke, Li Hong-Liang, Yoshimura Takayoshi, Miyazaki Aya, Oisaki Kounosuke, Hatanaka Miho, Shimizu Yohei, Kanai Motomu	4. 巻 5
2. 論文標題 Catalytic Regio- and Enantioselective Proton Migration from Skipped Enynes to Allenes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chem	6. 最初と最後の頁 585 ~ 599
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chempr.2018.11.022	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 Paria Suva, Kang Qi-Kai, Hatanaka Miho, Maruoka Keiji	4. 巻 9
2. 論文標題 Design of Efficient Chiral Bifunctional Phase-Transfer Catalysts Possessing an Amino Functionality for Asymmetric Aminations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 78 ~ 82
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.8b03292	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 Harabuchi Yu, Hatanaka Miho, Maeda Satoshi	4. 巻 2
2. 論文標題 Exploring approximate geometries of minimum energy conical intersections by TDDFT calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters: X	6. 最初と最後の頁 100007 ~ 100007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpletx.2019.100007	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 Endo Asuka, Hatanaka Miho, Ueno Nami, Morisawa Yusuke, Wakabayashi Tomonari	4. 巻 -
2. 論文標題 Bi2Ne: Weakly bound cluster of diatomic bismuth with neon	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Low Temperature Physics	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) なし	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 Aya Miyazaki、Miho Hatanaka	4. 巻 -
2. 論文標題 The Origins of the Stereoselectivity and Enantioswitch in the Rare Earth Catalyzed Michael Addition: A Computational Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemCatChem	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/cctc.201900555	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 Ryosuke Sata、Haru Suzuki、Nami Ueno、Yusuke Morisawa、Miho Hatanaka、Tomonari Wakabayashi	4. 巻 -
2. 論文標題 UV-Polarizing Linear Polyene Molecules Aligned in PVA	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chinese Journal of Chemical Physics	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) 10.1063/1674-0068/cjcp1812273	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 Hatanaka Miho、Osawa Ayato、Wakabayashi Tomonari、Morokuma Keiji、Hasegawa Miki	4. 巻 20
2. 論文標題 Computational study on the luminescence quantum yields of terbium complexes with 2,2'-bipyridine derivative ligands	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3328 ~ 3333
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CP06361J	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 Oku Tomoharu、Okada Masaki、Puripat Maneeporn、Hatanaka Miho、Morokuma Keiji、Choi Jun-Chul	4. 巻 25
2. 論文標題 Promotional effect of CH ₃ I on hydroxycarbonylation of cycloalkene using homogeneous rhodium catalysts with PPh ₃ ligand	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of CO ₂ Utilization	6. 最初と最後の頁 1 ~ 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcou.2018.02.015	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 畑中 美穂	4. 巻 16
2. 論文標題 自動反応経路探索を用いる不斉触媒反応の機構解明と機械学習による効率的解析	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 163 ~ 164
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2017-0065	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 Sharma Akhilesh K., Sameera W. M. C., Jin Masayoshi, Adak Laksmikanta, Okuzono Chiemi, Iwamoto Takahiro, Kato Masako, Nakamura Masaharu, Morokuma Keiji	4. 巻 139
2. 論文標題 DFT and AFIR Study on the Mechanism and the Origin of Enantioselectivity in Iron-Catalyzed Cross-Coupling Reactions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 16117 ~ 16125
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b05917	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 Stenger-Smith Jenny, Chakraborty Indranil, Sameera W.M.C., Mascharak Pradip K.	4. 巻 471
2. 論文標題 Antimicrobial silver (I) complexes derived from aryl-benzothiazoles as turn-on sensors: Syntheses, properties and density functional studies	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorganica Chimica Acta	6. 最初と最後の頁 326 ~ 335
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ica.2017.11.022	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 Ogawa Tomohiro, Sameera W. M. C., Yoshida Masaki, Kobayashi Atsushi, Kato Masako	4. 巻 47
2. 論文標題 Luminescent ionic liquids based on cyclometalated platinum(II) complexes exhibiting thermochromic behaviour in different colour regions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 5589-5594
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8DT00651B	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77件（うち招待講演 49件 / うち国際学会 26件）

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路のデータベースと機械学習を用いた触媒推薦システムの構築
3．学会等名 日本化学会第 101 春季年会(2021)（招待講演）
4．発表年 2021年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路自動探索を用いる触媒反応の理論的研究 - 機構解明・触媒設計を目指して -
3．学会等名 日本化学会第 101 春季年会(2021)（招待講演）
4．発表年 2021年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 理論・計算化学による機能性材料の機構解明と分子設計
3．学会等名 日本化学会第 101 春季年会(2021)（招待講演）
4．発表年 2021年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 自動反応経路探索を用いるハイブリッド触媒系の機構解明と反応性決定因子の抽出
3．学会等名 ハイブリッド触媒第4回公開シンポジウム（招待講演）
4．発表年 2021年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路のデータベースと機械学習を用いる触媒・発光材料の理解・分子設計
3．学会等名 分子研計算科学研究センターwork shop（招待講演）
4．発表年 2021年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 Theoretical study on Lanthanide Luminescence Materials
3．学会等名 ナノ学会合同部会シンポジウム（招待講演）
4．発表年 2020年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路自動探索を用いる触媒反応の理論的研究－機構解明・触媒設計を目指して－
3．学会等名 日本コンピュータ化学会2020年秋季年会（招待講演）
4．発表年 2020年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路のデータベースと機械学習を用いる触媒・発光材料の理解・分子設計
3．学会等名 近畿化学協会 機能性色素部会・エレクトロニクス部会合同 公開講演会（招待講演）
4．発表年 2020年

1. 発表者名 畑中美穂
2. 発表標題 理論・計算化学を用いるランノイド発光材料の理解・分子設計
3. 学会等名 錯体化学会オンライン研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 W. M. C. Sameera
2. 発表標題 Radical species on interstellar ices: a quantum mechanics/molecular mechanics study
3. 学会等名 CICO-VICO Fall 2020 Workshop（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 W. M. C. Sameera
2. 発表標題 Advances and challenges in modelling reaction mechanisms
3. 学会等名 Department of Chemistry School of Life Sciences, University of Sussex, UK（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 W. M. C. Sameera
2. 発表標題 On the mechanistic puzzles of homogeneous catalysis.
3. 学会等名 Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu University, Japan.（招待講演）
4. 発表年 2020年

1 . 発表者名 M. Hatanaka
2 . 発表標題 Database and Machine-Learning Enabled New Insights into the Lanthanide Luminescence Materials
3 . 学会等名 The 9th Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 M. Hatanaka
2 . 発表標題 Application of automated reaction path search method to a systematic search of transition states
3 . 学会等名 The 1st International Symposium on Hybrid Catalysis for Enabling Molecular Synthesis on Demand (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 M. Hatanaka
2 . 発表標題 Theoretical prediction of luminescent intensities lanthanide complexes
3 . 学会等名 International Symposium on Circularly polarized luminescence and Related Phenomena (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 M. Hatanaka
2 . 発表標題 Computational Chemistry Meets Machine Learning: A Case Study of Lanthanide Luminescence Material
3 . 学会等名 The 19th Tateshina Conference (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 量子化学計算と機械学習の融合による化学現象の理解の深化と新規材料の設計
3．学会等名 大阪府立大RIMED第21回研究会（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 量子化学と機械学習の効率的活用
3．学会等名 新化学技術推進協会 先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会講演会（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 Database and Machine-Learning Enabled New Insights into the Lanthanide Luminescence Materials
3．学会等名 大阪府立大学マテリアル工学コロキウム（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 マテリアルズ・インフォマティクス概念と要素技術～今日から始める機械学習・化学屋編～
3．学会等名 分析化学近畿支部若手の会（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路自動探索を用いる機構解析と機械学習による効率的材料探索
3．学会等名 有機合成化学協会「AIと有機合成化学」第3回勉強会（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 量子化学計算によるマイクロ波効果の解明2
3．学会等名 電磁波励起反応場第188委員会 2019年度第2回ワークショップ（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 消光経路のデータベースと機械学習を用いるランタノイド発光材料の理解・分子設計
3．学会等名 光機能材料研究会第73回講演会（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 吉村誠慶，松尾司，畑中美穂
2．発表標題 ハーフベアレント型ジアゾメタンの光反応に関する理論的研究
3．学会等名 第42回ケモインフォマティクス討論会
4．発表年 2019年

1．発表者名 奥野博貴，畑中美穂
2．発表標題 14族元素化合物の安定性と結合性に関する理論的研究
3．学会等名 第42回ケモインフォマティクス討論会
4．発表年 2019年

1．発表者名 永野駿介，中野宏明，高橋亮則，畑中美穂
2．発表標題 金属錯体を触媒とするアルキド樹脂重合機構の理論的解明
3．学会等名 第42回ケモインフォマティクス討論会
4．発表年 2019年

1．発表者名 吉村誠慶，荻原陽平，坂井教郎，畑中美穂
2．発表標題 人工力誘起反応法を用いたパラジウム触媒による分子内環化反応経路の探索
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 永野駿介，中野宏明，高橋亮則，畑中美穂
2．発表標題 金属錯体を触媒とするアルキド樹脂重合機構の理論的解明
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 W. M. C. Sameera
2. 発表標題 Exploring mechanistic puzzles in Pd-catalyzed aziridine ring-opening reactions
3. 学会等名 The Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 W. M. C. Sameera, F. Maseras
2. 発表標題 Combining modern force fields with ONIOM(QM:MM): the SICTWO interface.
3. 学会等名 The Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 W. M. C. Sameera
2. 発表標題 On the reaction mechanisms: quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) studies.
3. 学会等名 The 1st Symposium International on Hybrid Catalysis for Enabling Molecular Synthesis on Demand (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Miho Hatanaka
2. 発表標題 Theoretical prediction of luminescent intensities lanthanide complexes
3. 学会等名 International Symposium on Circularly polarized luminescence and Related Phenomena (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1．発表者名 Miho Hatanaka
2．発表標題 Application of Automated Reaction Path Search: Beyond the Mechanistic Study
3．学会等名 Fukui 2018 Satellite Symposium (招待講演) (国際学会)
4．発表年 2018年

1．発表者名 Miho Hatanaka
2．発表標題 Computational study on the lanthanide luminescent materials
3．学会等名 43rd International Conference on Coordination Chemistry (招待講演) (国際学会)
4．発表年 2018年

1．発表者名 Miho Hatanaka
2．発表標題 Application of Automated Reaction Path Search Method to a Systematic Search of Transition States: A Case Study on Asymmetric Catalytic Reaction
3．学会等名 Computational Catalysis for Sustainable Chemistry (招待講演) (国際学会)
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 データ駆動型材料設計-少ないデータからどう予測モデルを作るか？
3．学会等名 日本化学会第99春季年会(2019) (招待講演)
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 発光・消光経路のデータベース化によるランタノイド発光材料の分子設計指針の構築
3．学会等名 凝縮系の理論化学（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路自動探索による触媒反応の機構解明と機械学習による効率的解析
3．学会等名 第5回放射光連携研究ワークショップ（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 マテリアルズ・インフォマティクス概念と要素技術
3．学会等名 山口大学理学部 第2回機能分子創成研究会（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 データ数の少ない機能性材料の設計にインフォマティクスの技術をどう活かすか？
3．学会等名 第8回CSJ化学フェスタ2018（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 蛍光分子材料設計とマテリアルズインフォマティクス
3．学会等名 第79回応用物理学会秋季学術講演会（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 自動反応経路探索を用いる機構解析と機械学習による効率的材料探索
3．学会等名 次世代接着材料研究会PartII 第2回例会（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路自動探索による触媒反応の機構解明と機械学習による効率的解析
3．学会等名 近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会（第102回例会）（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路自動探索による機構解析と理論的材料設計に向けた試み
3．学会等名 第3期CMMフォーラム 本例会（招待講演）
4．発表年 2018年

1 . 発表者名 Miho Hatanaka
2 . 発表標題 Database and machine-learning enabled new insights into the lanthanide luminescent materials
3 . 学会等名 PRESTO International Symposium on Materials Informatics (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Miho Hatanaka
2 . 発表標題 Theoretical study on the emission intensities from lanthanide materials
3 . 学会等名 34th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Anna Kamada, Miho Hatanaka
2 . 発表標題 Computational study on the stereoselective ring-opening alkylation catalyzed by chiral triazolium salt
3 . 学会等名 34th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Maneeporn Puripat, Miho Hatanaka, Masaki Okada, Tomoharu Oku, Jun-Chul Choi
2 . 発表標題 Theoretical investigation of catalytic hydrocarboxylation of olefins with CO ₂
3 . 学会等名 34th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1．発表者名 Aya Miyazaki, Miho Hatanaka
2．発表標題 Theoretical study on enantioselective Michael addition catalyzed by chiral rare earth metal/ N,N' -Dioxide Complexes
3．学会等名 34th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4．発表年 2018年

1．発表者名 T. Yoshimura, Y. Ogiwara, N. Sakai, M. Hatanaka
2．発表標題 Theoretical Study on Palladium-Catalyzed Intramolecular Cyclization
3．学会等名 7th JCS Symposium (国際学会)
4．発表年 2018年

1．発表者名 宮崎文、畑中美穂
2．発表標題 不斉希土類 N,N' -ジオキシド誘導体を触媒とするマイケル付加反応の立体選択性発現機構の解明
3．学会等名 第34回希土類討論会
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 希土類錯体の発光・消光過程に関する理論的研究
3．学会等名 第34回希土類討論会
4．発表年 2018年

1．発表者名 吉村誠慶、荻原陽平、坂井教郎、畑中美穂
2．発表標題 パラジウム(0)触媒を用いた分子内環化反応に関する理論的研究
3．学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4．発表年 2018年

1．発表者名 宮崎文、畑中美穂
2．発表標題 不斉希土類N,N'-ジオキソ誘導体を触媒とするマイケル付加反応の 立体選択制発現機構の解明
3．学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4．発表年 2018年

1．発表者名 鎌田安奈、畑中美穂
2．発表標題 不斉トリアゾリウム塩を触媒とする開環アルキル化における立体選択性発現機構の解明
3．学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4．発表年 2018年

1．発表者名 Maneeporn Puripat, Masaki Okada, Tomoharu Oku, Jun-Chul Choi, Miho Hatanaka
2．発表標題 Theoretical Investigation of Catalytic Hydrocarboxylation of Olefines with CO ₂
3．学会等名 Catalysis and Fine Chemicals 2018 (C&FC 2018) (国際学会)
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 反応経路自動探索による機構解析と理論的材料設計に向けた試み
3．学会等名 第31期Cammフォーラム 本例会（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 自動反応経路探索による光機能性材料の機能予測
3．学会等名 日本化学会 第98春季年会（2018）（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 自動反応経路探索を用いる触媒反応の機構解析と機械学習を用いた効率化への試み
3．学会等名 さがけマテリアルズインフォマティクス 第1回公開シンポジウム（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 自動反応経路探索を用いる機構解明と機械学習を用いる計算の効率化
3．学会等名 大阪大学産業科学研究所 ナノテクセンター若手セミナー（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 自動反応経路探索を用いる不斉アルドール反応の機構解明と機械学習を用いた効率的解析
3．学会等名 分子合成オンデマンドを実現するハイブリッド触媒系の創製 第一回公開シンポジウム（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 自動反応経路探索を用いる触媒反応の機構解析と機械学習を用いた効率化への試み
3．学会等名 分子系の複合電子機能第181委員会 第28回研究会（招待講演）
4．発表年 2018年

1．発表者名 Miho Hatanaka
2．発表標題 Lanthanide Chemistry: Catalytic Reaction and Luminescence
3．学会等名 The 21th East Asian Workshop on Chemical Dynamics（招待講演）（国際学会）
4．発表年 2017年

1．発表者名 畑中美穂
2．発表標題 柔らかな不斉触媒系における立体選択性発現機構の解明
3．学会等名 新学術領域「柔らかな分子系」第24回ワークショップ 若手研究者が描く分子理論の未来」（招待講演）
4．発表年 2017年

1. 発表者名 Miho Hatanaka
2. 発表標題 Computational study on the thermosensitivity of the emission intensities from lanthanide materials
3. 学会等名 9th 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 Miho Hatanaka
2. 発表標題 Global Reaction Route Mapping Study on Asymmetric C-C Bond Formation
3. 学会等名 4th Challenges in Computational Homogeneous Catalysis (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 畑中美穂
2. 発表標題 自動反応経路探索を用いる不斉触媒反応の機構解明と機械学習による効率的解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2017秋季年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Miho Hatanaka
2. 発表標題 Theoretical Study on the Origin of the Enantioselectivity of Flexible Catalytic Systems
3. 学会等名 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1．発表者名 Maneeporn Puripat, Miho Hatanaka, Keiji Morokuma
2．発表標題 Theoretical Investigation of Catalytic Hydrocarboxylation of Olefins with CO ₂
3．学会等名 第11回分子科学討論会
4．発表年 2017年

1．発表者名 瀬川実礼, 中井英隆, 若林知成, 畑中美穂
2．発表標題 イリジウム二核錯体を用いる第一級アルコールの酸化反応に関する理論的研究
3．学会等名 第11回分子科学討論会
4．発表年 2017年

1．発表者名 Takayoshi Yoshimura, Yohei Ogiwara, Norio Sakai, Miho Hatanaka
2．発表標題 Theoretical study on palladium(0)-catalyzed intramolecular cyclization: formation of δ -lactam
3．学会等名 第15回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4．発表年 2018年

1．発表者名 鎌田安奈, 畑中美穂
2．発表標題 不斉トリアゾリウム塩を触媒とする開環アルキル化における立体選択性発現機構の解明
3．学会等名 第15回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4．発表年 2018年

1. 発表者名 宮崎文, 畑中美穂
2. 発表標題 不斉希土類 N,N' - ジオキンド誘導体を触媒とするマイケル付加反応の立体選択性発現機構の解明
3. 学会等名 第15回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 W. M. C. Sameera
2. 発表標題 A hybrid QM/MM approach to calculate binding energies of radical species on crystalline water ice.
3. 学会等名 255th ACS National Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 W. M. C. Sameera
2. 発表標題 On the mechanism and selectivity of transition metal-catalyzed N-N and C-C bond formation reactions
3. 学会等名 8th Asia pacific conference in theoretical and computational chemistry (APCTCC8) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 W. M. C. Sameera
2. 発表標題 On the selectivity of transition metal catalysis: DFT and MC-AFIR studies
3. 学会等名 International conference on theoretical and high performance computational chemistry 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1．発表者名 W. M. C. Sameera
2．発表標題 Computational catalysis using quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) and artificial forceinduced reaction (AFIR) methods
3．学会等名 BIT's 8th Annual Global Congress of Catalysis 2017 (GCC-2017) (招待講演) (国際学会)
4．発表年 2017年

〔図書〕 計2件

1．著者名 畑中美穂	4．発行年 2018年
2．出版社 情報機構	5．総ページ数 237
3．書名 "マテリアルズ・インフォマティクスにおけるデータの取り扱い", マテリアルズ・インフォマティクス ～データ科学と計算・実験の融合による材料開発～	

1．著者名 Romain Ramozzi, W. M. C. Sameera, Keiji Morokuma	4．発行年 2018年
2．出版社 World scientific publishing	5．総ページ数 624
3．書名 "Predicting reaction pathways from reactants", Applied Theoretical Chemistry	

〔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
研究分担者	Sameera W. M. C. (Sameera W. M. C.) (90791278)	北海道大学・低温科学研究所・特任助教 (10101)	

6．研究組織（つづき）

	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	諸熊 奎治	京都大学・福井謙一記念研究センター・研究員	削除：平成30年1月29日
	(Morokuma Keiji)		
	(40111083)	(14301)	

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