

計算分子科学研究部門

江 原 正 博（教授）（2008 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，理論触媒化学，光物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 光学物性に関する分子集合体の理論的逆設計法の開発と応用
- b) 単層カーボンナノチューブの化学修飾による量子欠損の生成と近赤外発光波長制御
- c) Pt 発光錯体の熱耐性燐光発光制御：芳香族性および π 共役構造と発光性能の相関
- d) 多配置電子相関理論に基づく電子共鳴状態理論の開発と電子付加結合解離系への応用
- e) 担持白金サブナノクラスターの構造と酸素還元反応に対する高い触媒活性の要因
- f) 金属微粒子触媒の理論解析：低温 NO 還元反応の反応機構および金属ナノ粒子の系統的分類
- g) ロジウムナノシートによる CO-NO 反応の高い触媒活性の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子集合体の光学物性は、分子組成と集合体の構造により大きく変化することが知られており、新奇光学物質の開発を目指して、様々な分子集合体が開発されている。研究開発においては、光機能－構造の関係の解明と設計指針が必要とされる。本年度、光学物性の計算の逆問題に基づく光機能性分子集合体の設計法を開発した。本方法は、候補分子集合体を表すハミルトニアンを導入し、全探索が困難である莫大な候補分子集合体群において最適化による合理的かつ効率的な設計を可能にした。この方法を複数の候補分子種と候補空間配置をもつ一次元分子集合体の設計に適用し、強い光吸収・円二色性（CD）をもつ集合体の分子組成・構造を提案した。また、適切な分子集合体の設計・形成と構成分子数の増大により、非線形的に CD を増大可能であることを明らかにした。高い光機能を得るために設計法による提案と精密な分子種・分子配向制御が重要であることを示した。
- b) 単層カーボンナノチューブ（SWCNT）では、化学修飾による分子変換および発光性量子欠陥が注目されている。実験と協力し、SWCNT の化学修飾による量子欠損の生成と近赤外発光の波長制御を研究した。第 1－第 3 世代のデンドロンを置換基に用い、置換基の立体効果によって付加位置を制御し、発光特性を制御することに成功した。また、分岐・環状アルキル基の化学修飾による付加位置制御および熱処理による発光波長制御にも成功し、その制御機構を理論計算によって明らかにした。さらに様々な径とカイラル指数の SWCNT(m,n) の系統的な理論計算を実施し、局所的 Clar 構造の六員環が最大数になるように置換され、発光波長を理論予測できることを見出した。この基礎原理に基づいて、径の異なる SWCNT の近赤外領域の発光波長制御が可能であることを示した。
- c) ヘテロ環状配位子を有する Pt, Ir 錯体は、金属－配位子電荷移動励起状態（ $^3\text{MLCT}$ ）から強い燐光発光を示す。本研究では、*trans*-Bis[(b-iminomethyl)aryloxy]Pt(II) 分子群を設計・合成し、77 K の低温において高い量子収率で強い燐光発光を示すことを見出した。一部の錯体では高温で消光するが、無輻射失活は $^3\text{MLCT}$ の反応面から最低エネルギー交差点（MECP）を経由して基底状態に緩和することを理論的に明らかにした。さらに燐光発光の熱耐性は、 $^3\text{MLCT}$ の安定構造と MECP のエネルギー差に相関していることを示した。また、MECP の相対エネルギー位置は、MECP 近傍で Pt $d\sigma^*$ 軌道が配位子の π^* 軌道と相互作用する強さによることを明らかにし、配位子のヘテロ環の芳香族性により制御できることを示した。

- d) 共鳴状態は準安定状態であり、電子状態では準安定アニオン、多価イオン、内殻ホール状態がある。我々は、電子共鳴状態の計算法として独自の射影型 CAP/SAC-CI 法や ACCC SAC-CI 法を開発し、任意の形状の分子に適用できるボロノイ・ポテンシャルを開発した。本年度は、多配置電子相関理論である XMS-CASPT2 法に複素吸収ポテンシャルを導入し、多配置性が重要となる結合解離領域やフェッシュバッハ共鳴に適用できる CAP/XMS-CASPT2 法を開発・実装した。この方法を H_2CO 分子や $\text{CH}_2\text{CH-Cl}$ 分子の結合解離、 N_2 分子の結合解離に適用し、方法の信頼性と有効性を検証した。 $\text{CH}_2\text{CH-Cl}$ 系では、電子付加共鳴状態 π^* から σ^* へと緩和し、C-Cl 結合解離が誘起される反応経路を明らかにした。
- e) 燃料電池には白金が利用されているが、白金は希少元素であり、使用量の低減が求められている。特に、正極における酸素還元反応 (ORR) において、高活性な白金ナノクラスターの電極触媒への利用が期待されている。慶應義塾大学・中嶋グループでは独自のパルスマグネトロンスパッタリング法により、原子数が数個から数百個のナノクラスターを固体基板上に担持させる方法を開発し、確立している。最近、この手法を用いて、担持白金 6 量体が現行の白金標準触媒に比べて ORR が 1.7 倍程度高い質量活性を示すことを見出した。本研究では、グラフェン担持白金 6 量体の局所安定構造を DFT 計算によって精査し、EXAFS の計測結果と比較することにより、6 量体の構造が双四面体構造であることを明らかにした。さらに白金 6 量体の d 軌道エネルギーレベルや電荷分布から白金サブナノクラスターの触媒活性の起源を議論した。
- f) 三元触媒の研究開発では、希少元素である PGM 元素の低減やユビキタス元素への転換が期待されている。NO 還元反応は特に重要であり、様々な担持微粒子触媒が検討されている。我々は、銅元素に着目した研究開発を実施している。Cu クラスタでは、NO-CO 反応において低温では NO の二酸化が起り、 N_2O を経由する反応機構が進行することを提案した。さらに Ru, Rh, Pd, Ag クラスタについて、金属クラスター (M_{13} , M_{55}) の理論計算モデルを用いて検討し、 $\text{M} = \text{Ru}, \text{Rh}$ では NO の吸着解離が起り、原子状 N から反応が進行すること、 $\text{M} = \text{Pd}$ では NO の分子状吸着が起ること、 $\text{M} = \text{Ag}$ では NO の二酸化から反応が進行することを明らかにした。またこれらの反応機構が金属の d 軌道と s 軌道のエネルギーレベルと相関すること、金属の電子構造で分類されることを示した。
- g) Rh は三元触媒に実装されており、高活性であるが希少元素であり、その減量が望まれている。最近、熊本大・町田グループの独自のアークプラズマ法により、Rh ナノシートが Rh ナノ粒子よりも NO 還元反応で高い触媒活性を示すことが見出され、Rh の大幅な減量の方法が開発された。本研究では、第一原理分子動力学シミュレーションの遷移状態探索により、NO 還元反応について Rh ナノシートと Rh ナノ粒子の触媒活性について比較・検討した。 Rh_{55} クラスタ (1 nm 程度の直径) では、構造を柔軟に緩和できるために N 原子の配置に合わせて構造が歪み、中間体を安定化し、エネルギー障壁が高くなることを明らかにした。一方、Rh(111) 面のナノシートは剛直な形状を持ち、N 原子のホッピングが容易になり、安定な中間体を生成しないことから、Rh ナノ粒子よりも高活性であることを明らかにした。

B-1) 学術論文

Y. MAEDA, H. MURAKOSHI, H. TAMBO, P. ZHAO, K. KURODA, M. YAMADA, X. ZHAO, S. NAGASE and M. EHARA, "Thermodynamic Control of Quantum Defects on Single-Walled Carbon Nanotubes," *Chem. Commun.* **55**, 13757–13760 (2019).

Y.-X. ZHAO, M.-Y. LI, P. ZHAO, M. EHARA and X. ZHAO, "New Insight into $\text{U}@\text{C}_{80}$: Missing $\text{U}@\text{D}_3(31921)\text{-C}_{80}$ and Nuanced Enantiomers of $\text{U}@\text{C}_1(28324)\text{-C}_{80}$," *Inorg. Chem.* **58**, 14159–14166 (2019).

- H. TSUNOYAMA, A. OHNUMA, K. TAKAHASHI, A. VELLOTH, M. EHARA, N. ICHIKUNI, M. TABUCHI and A. NAKAJIMA**, “Enhanced Oxygen Reduction Activity of Platinum Subnanocluster Catalysts through Charge Redistribution,” *Chem. Commun.* **55**, 12603–12606 (2019).
- S. HU, W. SHEN, P. ZHAO, T. XU, Z. SLANINA, M. EHARA, X. ZHAO, Y. XIE, T. AKASAKA and X. LU**, “Crystallographic Characterization of $\text{Er}_2\text{C}_2@C_2(43)\text{-C}_{90}$, $\text{Er}_2\text{C}_2@C_2(40)\text{-C}_{90}$, $\text{Er}_2\text{C}_2@C_2(44)\text{-C}_{90}$, and $\text{Er}_2\text{C}_2@C_1(21)\text{-C}_{90}$: The Role of Cage-Shape on Cluster Configuration,” *Nanoscale* **11**, 17319–17326 (2019).
- Y.-X. ZHAO, M.-Y. LI, R.-S. ZHAO, K. YUAN, P. ZHAO, M. EHARA, S. NAGASE and X. ZHAO**, “Pivotal Role of Nonmetal Atoms in the Stabilities, Geometries, Electronic Structures, and Isoelectronic Chemistry of $\text{Sc}_3\text{X}@C_{80}$ (X = C, N and O),” *J. Comput. Chem.* **40**, 2730–2738 (2019).
- Y.-X. ZHAO, K. YUAN, M.-Y. LI, M. EHARA and X. ZHAO**, “In-Depth Theoretical Probe into Novel Mixed-Metal Uranium-Based Endohedral Clusterfullerenes $\text{Sc}_2\text{UX}@I_h(31924)\text{-C}_{80}$ (X = C, N),” *Inorg. Chem.* **58**, 10769–10777 (2019).
- N. TAKAGI, K. ISHIMURA, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI**, “Reaction Behavior of NO Molecule on Surface of M_n Particle (M = Ru, Rh, Pd, and Ag; $n = 13$ and 55): Theoretical Study of Its Dependence on Transition-Metal Element,” *J. Phys. Chem. A* **123**, 7021–7033 (2019).
- P. ZHAO, Y. MAEDA and M. EHARA**, “Theoretical Insight into Configurational Selectivity of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes Based on Clar Sextet Theory,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 18629–18637 (2019).
- S. KINOSHITA, Y. INOKUCHI, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, N. AKAI, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, K. YAMAZAKI, Y. HARABUCHI, S. MAEDA and T. EBATA**, “The Direct Observation of the Doorway $^1n\pi^*$ State of Methylcinnamate and Hydrogen-Bonding Effects on the Photochemistry of Cinnamate-Based Sunscreens,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 19755–19763 (2019).
- S. HU, P. ZHAO, W. SHEN, P. YU, W. HUANG, M. EHARA, Y. XIE, T. AKASAKA and X. LU**, “Crystallographic Characterization of $\text{Er}_3\text{N}@C_{2n}$ ($2n = 80, 82, 84, 88$): The Importance of a Planar Er_3N Cluster,” *Nanoscale* **11**, 13415–13422 (2019).
- M. SUDA, Y. THATHONG, V. PROMARAK, H. KOJIMA, M. NAKAMURA, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA and H. M. YAMAMOTO**, “Light-Driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters,” *Nat. Commun.* **10**, 2455 (7 pages) (2019).
- Y. MAEDA, K. KURODA, H. TAMBO, H. MURAKOSHI, Y. KONNO, M. YAMADA, P. ZHAO, X. ZHAO, S. NAGASE and M. EHARA**, “Influence of Local Strain Caused by Cycloaddition on the Band Gap Control of Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes,” *RSC Adv.* **9**, 13998–14003 (2019).
- G. HAMASAKA, H. TSUJI, M. EHARA and Y. UOZUMI**, “Mechanistic Insight into the Catalytic Hydrogenation of Nonactivated Aldehydes with a Hantzsch Ester in the Presence of a Series of Organoboranes: NMR and DFT Studies,” *RSC Adv.* **9**, 10201–10210 (2019).
- T. SHIRAOGAWA and M. EHARA**, “Theoretical Study on the Optical Properties of Multichromophoric Systems Based on an Exciton Approach: Modification Guidelines,” *ChemPhotoChem* **3**, 707–718 (2019). (Front Cover)
- H. YOSHIDA, K. KOIZUMI, M. BOERO, M. EHARA, S. MISUMI, A. MATSUMOTO, Y. KUZUHARA, T. SATO, J. OHYAMA and M. MACHIDA**, “High Turnover Frequency CO–NO Reactions over Rh Overlayer Catalysts: A Comparative Study Using Rh Nanoparticles,” *J. Phys. Chem. C* **123**, 6080–6089 (2019).

N. TAKAGI, K. ISHIMURA, H. MIURA, T. SHISHIDO, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI, “Catalysis of Cu Cluster for NO Reduction by CO: Theoretical Insight into the Reaction Mechanism,” *ACS Omega* **4**, 2596–2609 (2019).

R. INOUE, M. NAITO, M. EHARA and T. NAOTA, “Heat-Resistant Properties in the Phosphorescence of Trans-Bis[β -(Iminomethyl)Aryloxy] Platinum(II) Complexes: Effect of Aromaticity on d- π Conjugation Platforms,” *Chem. –Eur. J.* **25**, 3650–3661 (2019).

M. EHARA and U. DEVA PRIYAKUMAR, “Gold-Palladium Nanocluster Catalysts for Homocoupling: Electronic Structure and Interface Dynamics,” *Chem. Rec.* **19**, 947–959 (2019).

S. M. A. H. SIDDIKI, M. N. RASHED, M. A. ALI, T. TOYAO, P. HIRUNSIT, M. EHARA and K. SHIMIZU, “Lewis Acid Catalysis of Nb₂O₅ for Reactions of Carboxylic Acid Derivatives in the Presence of Basic Inhibitors,” *ChemCatChem* **11**, 383–396 (2019).

N. TAKAGI, M. NAKAGAKI, K. ISHIMURA, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI, “Electronic Processes in NO Dimerization on Ag and Cu Clusters: DFT and MRMP2 Studies,” *J. Comput. Chem.* **40**, 181–190 (2019). (Festschrift for Prof. Keiji Morokuma)

T. SHIRAOGAWA, G. CANDEL, R. FUKUDA, I. CIOFINI, C. ADAMO, A. OKAMOTO and M. EHARA, “Photophysical Properties of Fluorescent Imaging Biological Probes of Nucleic Acids: SAC-CI and TD-DFT Study,” *J. Comput. Chem.* **40**, 127–134 (2019). (Festschrift for Prof. Keiji Morokuma)

B-3) 総説, 著書

M. EHARA and Y. MORISAWA, “Theoretical and Experimental Molecular Spectroscopy of Far-Ultraviolet Region,” in *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach*, Y. Ozaki, M. J. Wojcik and J. Popp, Eds., Wiley, pp. 119–145 (2019).

前田 優, 山田道夫, 江原正博, 「化学修飾によるカーボンナノチューブの機能化と評価」, “Chemical Functionalization and Characterization of Carbon Nanotube,” *炭素* **290**, 183–194 (2019).

高木 望, 福田良一, 江原正博, 榊 茂好, 「コアシェル型複合金属クラスターの安定性と電子状態: 理論的アプローチ」, *J. Comput. Chem., Japan*, 特集号「触媒・電池の元素戦略研究: 理論計算化学からのアプローチ」, **18**, 38–48 (2019).

B-4) 招待講演

T. SHIRAOGAWA and M. EHARA, “Theoretical Design of Photofunctional Molecular Aggregates for Chiroptical Properties: An Inverse Design Approach,” International Symposium on Circularly Polarized Luminescence and the Related Phenomena, Tokyo (Japan), December 2019.

M. EHARA, “Reaction and Dynamics at Interface Region of Condensed-Phase Au-Pd Nanocluster Catalysts,” Japan-India Mini Workshop, Kobe (Japan), October 2019.

M. EHARA, “Coordination Asymmetry: Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems,” The 9th Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019), Sydney (Australia), September 2019.

M. EHARA, “Theoretical Approaches for Coordination Asymmetry: Photoreaction in MMF and Chiroptical Spectroscopy,” Combination of Theoretical/Computational Studies and Experiments toward Porous Coordination Polymers/ Metal Organic Frameworks, Oslo (Norway), August 2019.

M. EHARA, “Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2019 (PACCON 2019), Bangkok (Thailand), February 2019.

江原正博,「合金微粒子触媒の構造と機能に関する理論研究」,触媒学会若手会第40回夏の研修会,愛知,田原,2019年7月.

B-6) 受賞, 表彰

江原正博, APATCC (Asia-Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists) Pople Medal (2009).

江原正博, QSCP (Quantum Systems in Chemistry and Physics) Promising Scientist Award of CMOA (Centre de Mecanique Ondulatoire Appliquee) (2009).

江原正博, 特別研究員等審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査員表彰 (2018).

白男川貴史, 第22回理論化学討論会最優秀ポスター賞 (2019).

白男川貴史, 第13回分子科学討論会優秀ポスター賞 (2019).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

近畿化学協会幹事 (2007–2013).

日本化学会東海支部常任幹事 (2011–2012, 2015).

日本化学会東海支部会計幹事 (2016).

日本化学会学術賞・進歩賞選考委員会分野別選考委員(複合領域) (2017–2018).

触媒学会元素戦略研究会世話人会委員 (2013–).

触媒学会界面分子変換研究会世話人会委員 (2015–).

触媒学会コンピュータの利用研究会世話人会委員 (2018–).

理論化学研究会世話人会委員 (2018–2019).

理論化学会幹事 (2019–).

学会の組織委員等

XIIth International Congress of Quantum Chemistry, Kyoto, Japan, Local Committee Member (2006).

VIIth Congress of International Society for Theoretical Chemical Physics, Organization Committee (2008).

第3回分子科学討論会実行委員 (2009).

The Vth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Nara, Japan, Vice President, Organization Committee (2012–2013).

Charge Transfer Modeling in Chemistry: New Methods and Solutions for a Long-Standing Problem, Paris, France, Organization Committee (2014–2015).

Pacificchem 2015: Symposium (#277) Interplay between Theory and Experiment in Catalytic Research, Corresponding Symposium Organizer (2014–2015).

Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Local Committee (2016).

分子研研究会「触媒の分子科学：理論と実験のインタープレイ最前線」所内対応 (2016).

第 33 回化学反応討論会 2017 実行委員 (2016–2017).

The VIIth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Prague, Czech, Organization Committee (2017–2018).

The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, International Advisory Board (2017).

分子研研究会「電池の分子科学：理論と実験のインタープレイ最前線」所内対応 (2018).

第 21 回理論化学討論会実行委員 (2018).

第 13 回分子科学討論会実行委員, 副実行委員長 (2018–2019).

Pacificchem 2020: Symposium (#393) Triangle of Heterogeneous Catalysis, Surface Science, and Theory, Corresponding Symposium Organizer (2018–2020).

The Vth Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC) Conference, Sapporo, Japan, Organizing Committee (2019–2020).

The VIIIth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Sapporo, Japan, Organization Committee (2019–2020).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2012–2013).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2016–2017).

日本学術振興会国際事業委員会書面審査員・書面評価員 (2016–2017).

日本学術振興会卓越研究員候補者選考委員会書面審査員 (2016–2017).

日本学術振興会外国人特別研究員(一般)書面審査員 (2017–2018).

科学技術振興機構 (JST) 専門評価委員 (2017).

学会誌編集委員

Journal of Computational Chemistry, Editor (2012–).

Theoretical Chemistry Accounts, Editorial Board (2015–).

Theoretical Chemistry Accounts, Special Issue of Charge Transfer Modeling in Chemistry, Guest Editor (2015–2016).

The Chemical Record, Editorial Board (2015–).

The Chemical Record, Special Issue of “Challenges in Catalysis: From Theory to Experiment,” Guest Editor (2015–2016).

The Chemical Record, Special Issue of “Next Generation Li and Na Rechargeable Batteries,” Guest Editor (2017–2018).

Journal of Computational Chemistry Japan, Special Issue of “Element Strategy for Catalysts and Batteries: Approach from Theoretical and Computational Chemistry,” Guest Editor (2018–2019).

その他

元素戦略プロジェクト「実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」電子論グループ・リーダー (2012–2021).

次世代スパコン戦略プログラム「計算物質科学イニシアティブ」CMSI 運営委員会委員, 企画室会議委員, 第3部会小委員会委員 (2011–2015).

シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」連携研究委員会委員 (2016–).

量子化学スクール世話人 (2011–).

計算物質科学人材育成コンソーシアムイノベーション創出人材育成委員会委員 (2015–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2019-).
計算物質科学連絡会議委員 (2019-).
計算物質科学協議会準備委員会委員 (2019-).
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発ナノ統合ソフト担当 (2008-2011).
総合研究大学院大学物理科学コース別教育プログラム運営委員 (2016-).
物質機能の解明・開拓先端研究統合教育プログラムWG 委員 (2016-).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「基礎理論化学」, 2019年 7月 4日-5日, 9日-10日.
総合研究大学院大学物理科学研究科, 分光学基礎コース, 2019年 3月 11日-13日.
大阪大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2008年-2019年, 集中講義「計算機化学」, 2019年 4月 25日-26日.
京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット, 拠点教授, 2012年 9月- .
北海道大学触媒研究所, 招へい教員, 2018年 4月- 2019年 3月.

B-10) 競争的資金

二国間交流事業共同研究(日本-ノルウェー),「錯体超分子構造体の理論化学」, 江原正博 (2019年-2020年).
科研費新学術領域研究「配位アシンメトリー: 非対称配位圏設計と異方集積化が拓く新物質科学」(代表: 塩谷光彦)(計画研究),「非対称金属配位場を有する超分子系の構造・物性・反応に関する理論研究」, 江原正博 (2016年-2020年).
科研費基盤研究(B),「複雑量子状態の理論開発とナノ・バイオ系への応用」, 江原正博 (2016年-2018年).
元素戦略プロジェクト「実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」, 江原正博 (2012年-2021年).
科研費基盤研究(B),「強相関電子状態と電子共鳴状態の基礎理論の開発と複雑な量子状態への応用」, 江原正博 (2012年-2015年).
科学技術振興機構先導的物質変換領域(ACT-C),「多核金属の協働作用で生み出すクラスター触媒の新反応」, 江原正博(共同研究者) (2012年-2017年).
科研費特別推進研究,「d- 電子複合系の理論化学: 新しい高精度大規模計算法による微視的理解と予測」, 江原正博(研究分担者) (2010年-2014年).
科研費基盤研究(B),「内殻電子過程の超精密理論分光」, 江原正博 (2009年-2011年).
科学技術振興機構CREST 研究,「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」, 江原正博(研究分担) (2008年-2012年).
科研費特定領域研究(計画研究),「高精度電子状態理論の開発と励起状態化学への展開」, 江原正博 (2006年-2009年).

B-11) 産学連携

自動車用内燃機関技術研究組合(AICE),「計算化学による次世代ゼオライトの構造提案」, 江原正博 (2017年-2019年).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、高精度電子状態理論を基盤として、光機能性分子の電子過程や金属微粒子・バルク触媒を主たる対象とした理論研究を実施し、新しい化学概念を構築することを目的として研究を進めている。近年、電子状態理論では大規模化が進展し、ナノ材料やバイオ系への応用が展開している。しかし、複雑な励起状態や固体表面などに対して信頼性のある情報を提供できる理論は未だ開発途上にあり、さらに開発を進める必要がある。高機能化と大規模化の観点から我々の方法を発展させるとともに、固体表面を高精度に記述できる理論開発を行う。光機能性分子の電子過程の研究では、励起状態における構造緩和や分子間相互作用について検討し、分子システムとしての機能設計へと展開する。分子系・分子集合系の非対称性に関わる励起子相互作用や非対称因子、錯体光化学反応に関する理論研究を実験と協力して進める。また、表面-分子系の電子状態を適切に表現できる方法確立し、金属微粒子触媒、バルク触媒、表面光化学を理論的に解析する。触媒・電池元素戦略プロジェクトにおいて重要課題である自動車排ガス浄化触媒や化成品合成触媒に関する研究を実施する。