

【研究課題名】

感応性化学種による触媒反応の制御. 設計に関する理論的研究

【各研究項目の連携状況】

領域内の他の研究グループとの連携状況（予定を含む）について、①簡略化した共同研究内容②連携研究代表者姓（研究項目班）③共著論文の有無（件数）を研究内容毎に記載

①リン化合物の反応性に関する理論的研究 ②狩野直和(A01) ③有り

①[NiFe] ヒドロゲナーゼ水素分子活性化の理論的研究 ②大木靖弘(A04) ③なし

①パラジウム錯体による C-H 活性化の理論的研究 ②小澤文幸(A03) ③なし

① sigma aromaticity の理論的研究 ② 古川俊輔(A02) ③なし

【原著論文】

1. W. Sameera, A. Kumar Sharma, S. Maeda, *K. Morokuma, "Artificial Force Induced Reaction Method for Systematic Determination of Complex Reaction Mechanisms", *The Chemical Record*, **16**, 2349-2363 (2016).
2. W. Sameera, S. Maeda, *K. Morokuma, "Computational Catalysis Using the Artificial Force Induced Reaction Method", *Acc. Chem. Res.*, **49**, 763-773 (2016).
3. S. Sasaki, S. Suzuki, W. Sameera, K. Igawa, K. Morokuma, *G. Konishi, "Highly twisted N, N-dialkylamines as a design strategy to tune simple aromatic hydrocarbons as steric environment-sensitive fluorophores", *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 8194-8206 (2016).
4. ©*N. Kano, N.J. O'Brien, R. Uematsu, R. Ramozzi, *K. Morokuma, "Trihydroborates and Dihydroboranes Bearing a Pentacoordinated Phosphorus Atom: Double Ring Expansion To Balance the Coordination States", *Angew. Chem.*, in press. DOI: 10.1002/ange.201701718
5. M.-C. Yang, A.K. Sharma, W.C. Sameera, *K. Morokuma, *M.-D. Su, "Theoretical Study of Addition Reactions of L₄M (M= Rh, Ir) and L₂M (M= Pd, Pt) to Li⁺@C₆₀", *J. Phys. Chem. A*, **121**, 2665-2673 (2017).