

【研究課題名】

遷移金属含有ゼオライトを用いた生体酵素模倣触媒の創製における計算化学的アプローチ

【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 メタン直接酸化触媒の構築を目指した理論化学計算によるゼオライトと生体酵素との比較検討，
② 吉澤一成 (A04), ③ 無
- ① 窒素含有鉄オキソ錯体を触媒とするメタン C-H 結合活性化に関する速度論的同位体効果，
② 人見 穰 (A04), ③ 無

【研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用）】

[設備] ADF ソフトウェア

[使途] このソフトウェアにより、触媒機能を発現する遷移金属含有ゼオライトの電子状態および大規模系での遷移状態計算が可能になる。また、材料の光吸収特性および発光特性の実験的解釈が可能となっている。

【原著論文】

1. *M. Morisue, Y. Hoshino, M. Nakamura, T. Yumura, Y. Ooyama, M. Shimizu, J. Ohshita, “Group 14 Dithienometallore-Linked Ethynylene-Conjugated Porphyrin Dimers,” *Inorg. Chem.*, **55**, 7432-7441 (2016).
2. *R. Morita, *K. Gotoh, M. Fukunishi, K. Kubota, S. Komaba, N. Nishimura, T. Yumura, K. Deguchi, S. Ohki, T. Shimizu, H. Ishida, “Combination of Solid State NMR and DFT Calculation to Elucidate the State of sodium and lithium in Hard Carbon Electrodes,” *J. Mater. Chem. A*, **4**, 13183-13193 (2016).
3. *S. Iijima, T. Yumura, Z. Liu, “One-dimensional nanowires of aluminum monohydroxide-pseudoboehmite γ -AlO(OH),” *PNAS*, **113**, 111759-111764 (2016).
4. H. Imoto, S. Tanaka, T. Kato, T. Yumura, S. Watase, K. Matsukawa, *K. Naka, “Molecular Shape Sensing by Using a Switchable Luminescent Nonporous Molecular Crystal,” *Organometallics*, **35**, 3647-3650 (2016).
5. *T. Yumura, M. Kumondai, T. Wakasugi, Y. Kuroda, H. Kobayashi, “Utilizing Super-atom Orbital Ideas to Understand Properties of Silver Clusters inside ZSM-5 Zeolite,” *RSC Adv.*, **7**, 4950-4959 (2017).
6. S. Tanaka, H. Imoto, T. Yumura, *K. Naka, “An Arsenic Halogenation of 9-Arsafluorene and Utilization for As-C Bond Formation Reaction,” *Organometallics*, in press, DOI: 10.1021/acs.organomet.7b00198.

【総説・解説】

1. 湯村 尚史, 「銅担持ゼオライトを用いた生体酵素模倣触媒の創製における計算化学的アプローチ」, ゼオライト, 日本ゼオライト学会, **34**, 57-65 (2017).