

2024年3月に「§6. 成果発表等」の一部を修正しました

戦略的創造研究推進事業
研究領域「低エネルギー、低環境負荷で持続可能な
ものづくりのための先導的な物質変換技術の創出」
(ACT-C)

研究課題「量子シミュレーションに基づく不斉 C-H 活性化
触媒の開発」

研究終了報告書

研究期間 平成24年10月～平成30年3月

研究代表者：澤村正也
(北海道大学大学院理学研究院、教授)

目次

§ 1. 研究実施の概要	(2)
(1) 実施概要	
(2) 顕著な成果	
§ 3. 研究実施体制	(3)
(1) 研究体制について	
(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について	
§ 4. 研究実施内容	(4)
§ 6. 成果発表等	(13)
(1) 原著論文発表	
(2) その他の著作物	
(3) 国際学会発表及び主要な国内学会発表	
(4) 知財出願	
(5) 受賞・報道等	
(6) 成果展開事例	
§ 7. 研究期間中の活動	(59)
(2) 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動	

§ 1. 研究実施の概要

(1) 実施概要

本研究は、量子化学計算・動力学シミュレーションに基づく反応場設計によって、高効率触媒的不斉 C-H 結合変換反応を開発することを目的としている。

「研究項目 1：量子シミュレーション法の評価・改良・新手法開発（森 G、武次 G）」に関しては、人工力誘起反応（AFIR）法に基づく反応経路自動探索が C-H 活性化を含む不斉触媒反応の機構解明の強力な手段になることを確認した。また Cu 触媒不斉カルボニルアルキル化における第二配位圏溶媒和効果を DFT 計算で検証した。C-H 結合活性化を含む酵素反応における水の効果については、分子動力学シミュレーションと QM/MM 法を組み合わせで検討した。Rh 触媒の反応機構研究を通じて、高度に複雑な反応経路解明には AFIR 法のほかにグラフ理論のアプローチを用いることを提案し、そのアプローチが有用であることを示した。

「研究項目 2：既知反応の高効率化」では、澤村 G の実験と森 G のシミュレーションの連携により、Cu 触媒不斉カルボニルアルキル化の高効率化と適用範囲の拡大を実現するとともに、末端アルキンとニトロンの付加環化によるβ-ラクタムの不斉合成法を開発した。

「研究項目 3：C(sp²)-H 不斉付加反応の探索」では、末端アルキン C(sp)-H やヘテロアレーン C(sp²)-H の Cu 触媒不斉アリル化反応を開発し、第四級不斉炭素の構築にも展開し、その原理を応用して有機ホウ素、有機ケイ素化合物を用いる新規不斉反応を開発した（澤村 G）。

「研究項目 4：C(sp³)-H 不斉付加反応の探索」では、独自の固相担持ホスフィン配位子を用いて Ir 触媒による不活性 C(sp³)-H ホウ素化反応を開発した（澤村 G）。この成果をもとにキラルホスフィン配位子による不斉 C(sp³)-H ホウ素化反応を開発した。これらの研究の過程で、新しい固定化配位子としてポリスチレン多点架橋ホスフィンを開発し、C-H 活性化触媒の創製に有用であることを見出した。これらの研究の過程で、Pd 触媒による 2-アルキルピリジンの塩基フリーベンジル位不斉アリル化を見出した。

(2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1. シリカ担持ホスフィン-金属触媒による不活性 C(sp³)-H ホウ素化反応の開発 [JACS 2013, 135, 2947; CEJ 2014, 20, 13127; Synlett 2016, 27, 1187 (§6. (1) 原著論文 8, 54, 94)]

反応性の極めて乏しい C(sp³)-H 結合の直接ホウ素化反応を実現する新触媒を開発した。シリカ担持ホスフィンの配位特性に基づく不均一系 Ir 触媒を用いることで、不活性 C(sp³)-H 結合が、穏和な条件下、位置選択的にホウ素化される。末端 C-H 結合に加え、鎖状および環状内部の C-H 結合にも適用でき、合成化学上有用なアルキルホウ素化合物の一段階合成に成功した。

2. Cu 触媒による C(sp)-H および C(sp²)-H の不斉アリル化 [JACS 2014, 136, 13932; ACIE 2016, 55, 4777 (§6. (1) 原著論文 55, 91)]

末端アルキンの C(sp)-H 結合を触媒的に切断しながら直接不斉アリル化を行う新反応を開発した。この研究ではキラル N-ヘテロ環カルベン-フェノール複合配位子を新規開発し、協奏的銅触媒機構に基づく反応設計により高活性、高選択性を達成した。続いてこの研究をヘテロアレーンの不斉 C(sp²)-H アリル化反応に展開し、全炭素置換第 4 級不斉炭素中心の構築に成功した。C(sp²)-H 結合直接官能基化により全炭素置換第 4 級不斉炭素中心を構築する反応には前例がなく、C-H 官能基化の最先端の一つとして画期的な成果である。

<科学技術イノベーション・課題解決に大きく寄与する成果>

1. ポリスチレン多点架橋ホスフィンの発明と不活性 C(sp³)-H ホウ素化反応への応用 [ACIE 2013, 52, 12322; ACS Catal. 2017, 7, 1681 (§6. (1)論文発表 28, 115); (4) 知財出願①国内 1, 2 ②海外 1, 2]

不溶性高分子担体を反応場とする高活性金属錯体触媒を開発した。ポリスチレンを PPh₃ で三点架橋した固定化リン配位子は、塩化アリールの Pd 触媒クロスカップリングや Ir 触媒不活性 C(sp³)-H ホウ素化に有効である。本触媒設計概念をビスホスフィンへと拡張し、C-H 結合切断を含む Ni 触媒クロスカップリングに有効な固相担持配位子を開発した。(株)東ソー有機化学と配位子のバルク合成、触媒応用に関する共同研究を実施しており、産業利用への展開が期待される。

§ 3. 研究実施体制

(1) 研究体制について

① 「実験」グループ

研究代表者: 澤村 正也 (北海道大学大学院理学研究院、教授)

研究項目

- ・不斉 C-H 活性化触媒の開発
- ・不斉 C(sp²)-H 活性化触媒反応の開発
- ・不斉 C(sp³)-H 活性化触媒反応の開発

参画した研究者の数 (研究員 5 名、研究補助員 4 名、学生 34 名)

② 「大規模シミュレーション」グループ

主たる共同研究者: 森 聖治 (茨城大学理学部、教授)

研究項目

- ・金属触媒による C-H 活性化反応における理論の評価
- ・溶媒効果を露わに考慮した触媒反応シミュレーション
- ・銅触媒によるアルデヒド不斉アルキニル化反応の開発における量子シミュレーション
- ・不斉 C-H 活性化反応の探索における量子シミュレーション

参画した研究者の数 (研究員 2 名、研究補助員 0 名、学生 8 名)

③ 「高精度シミュレーション・新手法開発」グループ

主たる共同研究者: 武次 徹也 (北海道大学大学院理学研究院、教授)

研究項目

- ・金属触媒による C-H 活性化反応における理論の評価と新手法開発
- ・溶媒効果を露わに考慮した触媒反応シミュレーション
- ・既知反応の高効率化における GRRM の適用 (遷移状態配座自動探索)
- ・不斉 C-H 活性化反応の開発を支援する反応経路自動探索

参画した研究者の数 (研究員 5 名、研究補助員 0 名、学生 8 名)

アドバイザー: 諸熊奎治 (京都大学・福井謙一記念研究センター、教授)

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

産業界との連携として、東ソー有機化学(株)と澤村 G が「ポリマー型新規触媒の利用」に関して共同研究を実施している。また、澤村 G は和光純薬工業(株)および富士シリシア(株)と連携してシリカ担持配位子の市販化を実現した。

H24 年度 ACT-C 客員准教授として森 G に参画した Prof. Robert Szilagy (米国モンタナ州立大) と固相担持触媒の MD/DFT 計算と放射光測定に関する共同研究を継続して実施している。

その他の国際共同研究の実績としては、シリカ担持配位子を用いた Ir 触媒 C-H ホウ素化に関して、澤村 G とドイツの T. B. Marder 教授 (Würzburg 大) が共同研究で成果をあげている (論文発表、Chem. Asian J., vol. 9, pp 434–438, 2014 (§6. (1) 原著論文発表欄 論文 38))。またベルギーの O. Riant 教授 (ローベイン・カトリック大) から短期留学生を受け入れ銅触媒不斉反応に関する共同研究を実施し、成果をあげた。森 G は、タイ・カセサート大学 Supa Hannongbua 教授や Matthew Paul Gleeson 講師との共同研究を行い、ヘム酵素の反応の QM/MM 計算を報告し成果を挙げた (論文発表、J. Mol. Graph. Model. Vol. 52, pp 20-29, 2014)。

§ 4. 研究実施内容

研究項目 1 量子シミュレーション法の評価・改良・新手法開発 (茨城大 森 G、北大 武次 G)

①研究のねらい

C-H 結合活性化触媒および触媒反応の設計と開発を行うにあたり、実験に先立ち量子シミュレーションを行うことでこれを支援することを目指した。これを実現するために、まず既存のシミュレーション法の C-H 活性化への適用性について評価した。このような研究の中で明るみになった問題点を改良するとともに、これを契機にして斬新なシミュレーション新手法を開発することを目指した。

②研究実施方法

実験結果に基づくある程度の実績を足がかりに、以下のような段階を踏んでシミュレーション研究の進展を計った。なお、これらの反応開発研究と並行して、量子シミュレーションの適用による反応機構解明、量子シミュレーション法の改良、新シミュレーション法の開発を行った。

森 G は、Cu, Ni, Pd および Rh 触媒による C-H、C-O および C-C 結合活性化の機構を大規模理論計算によって解明する研究に取り組み、不斉 C-H 活性化反応の理論計算の課題を明らかにするとともに、その解決策となる計算手法を確立することを目指して研究を行った。

武次 G では、人工力誘起反応法 (AFIR 法) が搭載されている GRRM プログラムに対し、有機金属錯体上での様々な反応経路を自動探索できる単成分アルゴリズム (単成分 AFIR) の導入、100 原子程度の触媒系を丸ごと DFT 計算で扱うための高速 DFT プログラムとのインターフェイス開発、固体担持触媒反応をターゲットとした周期境界条件の導入、巨大な反応場の構造変化を効果的に取り入れるための QM/MM 計算アルゴリズム開発などを行った。

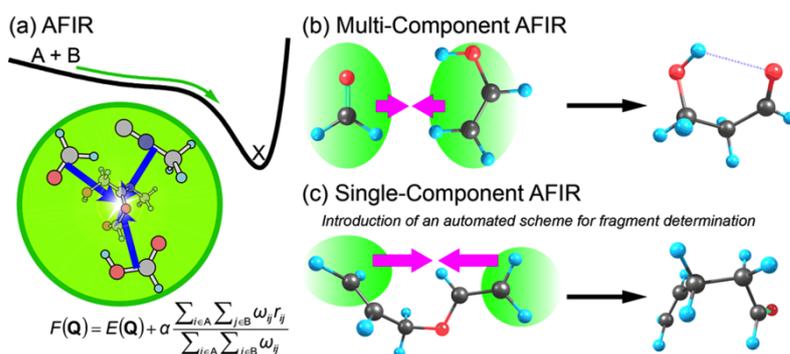
さらに森 G と武次 G が協力し、AFIR 法と QM/MM 法を結合させてキラル遷移金属錯体触媒による不斉反応の反応機構、選択性発現機構を解明する研究を行った。これらの研究を通じ、AFIR 法および、複雑な反応機構ネットワークを精査するグラフ理論のアプローチが C-H 活性化触媒や不斉合成の研究に有効であることを実証するとともに、理論研究上の課題を明らかにし、これを解決するためのプログラムの改良を行った。

③採択当初の研究計画(全体研究計画書)に対する研究達成状況(§ 2. と関連します)と得られた成果

(1) 金属触媒による C-H 活性化反応における理論の評価

〈新計算手法の開発〉 武次 G の前田が開発してきた反応経路自動探索法である人工力誘起反応

(AFIR) 法の開発を進め、分子間の反応経路を自動探索するために開発されてきた同手法 (今後「多成分 AFIR 法」と呼ぶ) を分子内の異性化経路および分子の分解経路にも適用できるよう拡張した (後者を「単成分 AFIR 法」と呼ぶ)。これにより、触媒中間体の異性化や分解を系統的に解析できるようになった。



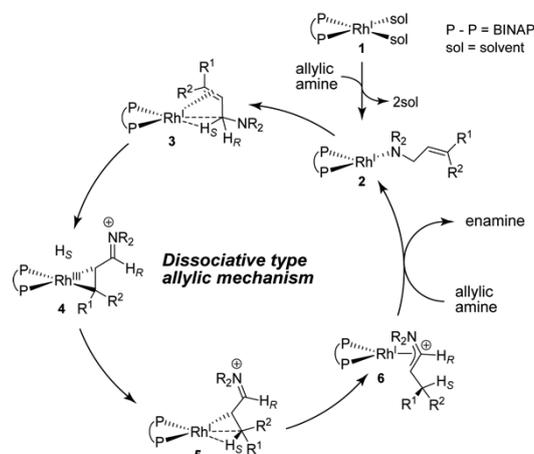
AFIR 法を表面担持触媒へと応用するために、AFIR 法が実装されている GRRM プログラムに周期境界条件を課した AFIR 計算を行うコードを実装した。このとき、周期境界 DFT 計算を行える SIESTA プログラムと GRRM プログラムとを結びつけた。今後、澤村 G のシリカ担持 Ir 触媒の機構解析とこれに基づく高機能触媒の設計へと応用することが可能である。

〈Ir 触媒による不活性 C(sp³)-H ホウ素化の反応経路探索〉 武次 G では、澤村 G が開発した Ir 触媒による 2-アルキルピリジンのホウ素化反応について、多成分 AFIR 法による反応経路探索を行った。その結果、同反応において達成された高い位置選択性を反応障壁の高さの違いから説明できた。また、遷移状態構造におけるエネルギー分割解析から、N-β 位の C-H 結合活性化ではピリジンと Ir の相互作用が弱まることで遷移状態が不安定化し、N-γ 位での反応が優先的に進むことも分かった。一方、C-H 活性化後に生じる中間体については多成分 AFIR 法では十分な解析が

できなかった。そこでこの問題を解決するため、新しく開発した単成分 AFIR 法によって触媒サイクル全体の詳細解析を行った。単成分人工力誘起反応法の触媒反応への実践的応用はこれが最初であり、同手法が強力な手法であることを示すことができた。単成分人工力誘起反応法については、触媒反応への応用を進めながら、さらなる効率化と適用性の向上を進めている。

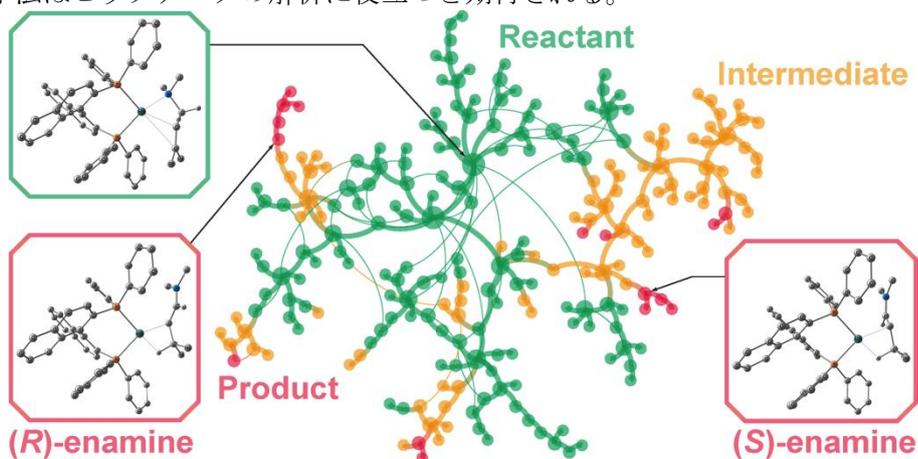
〈Rh(I)-BINAP 触媒によるアリルアミン不斉水素転位の反応経路探索〉

森 G・武次 G・澤村 G との共同研究で、反応経路自動探索(AFIR 法)と QM/MM 法を併用して Rh(I)-BINAP 触媒によるアリルアミンの不斉水素転位反応経路を網羅的に検討した。さらに、この結果に基づき、より高精度の DFT 計算を行った。この反応では、「基質のアミンが 1 分子相互作用する解離機構」が最も有利な反応経路でありことがわかり、過去のモデル化された反応系の DFT 計算に関する論文が提唱していた「アミンが 2 分子関与する会合機構」を大きく訂正する結果となった。右図のとおり、解離機構を伴い、一度基質のアミノ基が Rh に配位した中間体 **2** を作り、基質のアリル基が Rh に配位し直して π 錯体 **3** を形成してから C-H 結合への Rh の酸化的付加、それに続く還元的脱離によってアリルアミンの異性化が進行する反応経路がエネルギー的に有利であることを示し、学術誌論文に報告した。



④ 当初計画では想定されていなかった新たな展開があった場合、その内容と展開状況と得られた成果

本研究で多く用いた AFIR-GRRM 法では、膨大な複雑な反応経路ネットワークを描くことが可能であるが、Rh 触媒の不斉水素転位反応（上述）の機構検討を通じ、今までこの分野で応用されていなかったグラフ理論のアプローチ (Prim アルゴリズム) を組み合わせることではじめて、複雑な反応経路ネットワークの合理的抽出が可能であることを明らかにした(森 G,武次 G, 澤村 G:Chem. Sci. 2017)。下の図に、会合機構 Rh に対して BINAP と基質のアリルアミン 2 分子が相互作用している機構) よりも有利な解離機構 (Rh に対して BINAP とアリルアミン 1 分子が相互作用している機構) のエネルギー曲面の極小点 (安定構造) を結ぶ曲線の集まったグラフを示すが、太字の曲線は、抽出したエネルギーの低い経路を示す。この手法の適用は、当初計画では想定されていなかった。今後、この手法はビッグデータの解析に役立つと期待される。



研究項目 2 既知反応の高効率化 (北大 澤村 G、茨城大 森 G、北大 森 G)

①研究のねらい

量子シミュレーションによる触媒設計や反応設計のための基盤構築の題材として、研究代表者の澤村が自ら開発し、多くの知見を持っている反応を選び、その後の新反応設計や新形式の触媒創出にはこの研究の成果を活用することを計画した。具体的には、汎用性が高く、合成化学的利用度の高いキラルプロパルギルアルコールを安価な原料から一段階で高い原子効率で生成する末端アルキンによるカルボニル化合物のアルキニル化反応を選び、実用触媒の開発とその産業利用を目標として研究を行った。

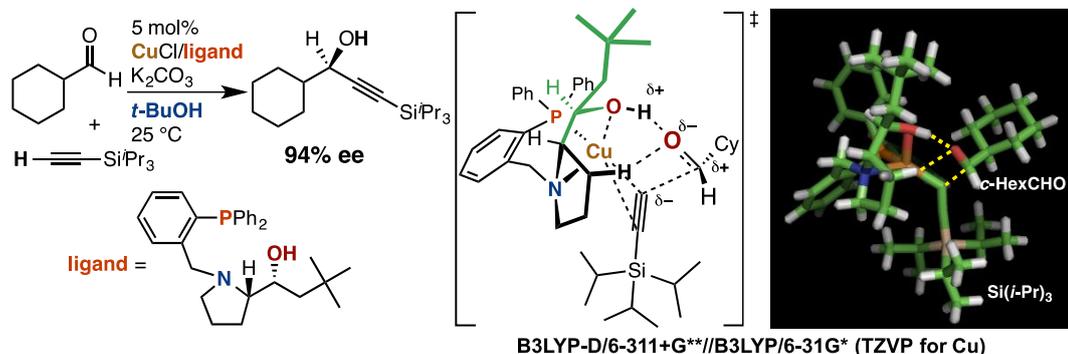
②研究実施方法

澤村 G が発見し、森 G との共同研究によって理論的反應機構研究を行ってきた「銅触媒による末端アルキンの C(sp)-H 直接活性化によるカルボニル化合物のアルキル化反応」についてさらに徹底的に検討することを研究のスタート地点とし、その成果を本 ACT-C 研究の展開の足がかりとすることとした。つまり予測された遷移状態の構造から類推されるいくつかの改良型触媒や補助因子(コファクター)となる添加物の候補について、触媒活性とエナンチオ制御能を DFT 計算によりシミュレートした後、高性能が予測されるものについて、その性能を実験で検証した。

武次 G は、「溶媒分子も露わに電子状態計算で取り扱う高精度シミュレーション」を実施するため、独自の手法「Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) 法」による第一原理シミュレーションおよび「反応経路自動探索プログラム Global Reaction Route Mapping (GRRM)」の「遷移状態配座自動解析」を本研究に適用することについて検討することとした。

③採択当初の研究計画(全体研究計画書)に対する研究達成状況(§ 2. と関連します)と得られた成果

澤村 G・森 G の共同研究では、末端アルキンの C(sp)-H 結合切断を経由したアルデヒドの不斉アルキニル化反応について、配位子—基質間水素結合がアルコール溶媒中で作用すること、非極性 C(sp³)-H 結合による非古典的水素結合が補助的に働く 2 点水素結合に基づく立体制御メカニズムを明らかにした。これらの結果に基づく触媒分子設計を行うことで、高性能の不斉触媒を開発し、90% ee を超える高エナンチオ選択性を実現した。また、自然科学研究機構・岡崎共通研究施設のスーパーコンピュータを活用して反応基質や不斉触媒の構造を簡略化しないほぼ実在系の大規模 DFT 計算を行い、実験のエナンチオ選択性を高精度に再現できることを示した。

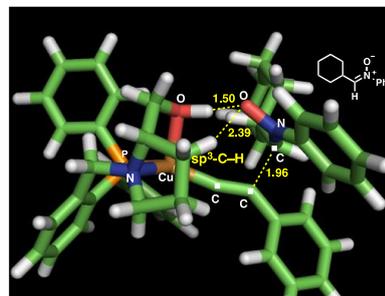
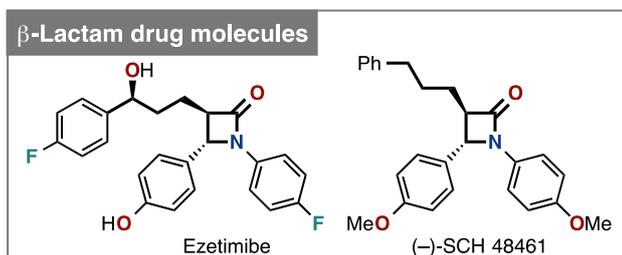


その後の展開研究により、プロリノール-ホスフィン構造の変更を行うことで、 α -ケトエステルと末端アルキンの反応によって光学活性第 3 級プロパルギルアルコールを高選択的に合成することに成功した。また分散力補正した DFT 計算により、ケトエステルの反応でも非極性 C(sp³)-H \cdots O 水素結合を含む 2 点水素結合だけでなく、基質のフェニル基と配位子のシクロヘキシル基の間の分散力に基づく立体制御が働くことを明らかにした。

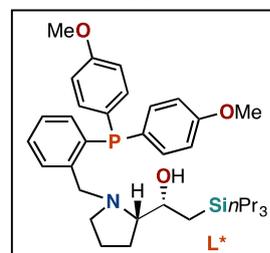
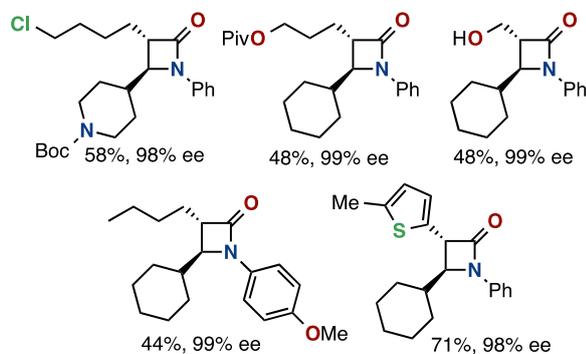
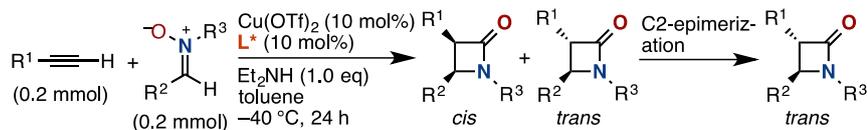
④当初計画では想定されていなかった新たな展開があった場合、その内容と展開状況と得られた成果

上記の銅触媒カルボニルアルキニル化反応の研究で、求電子剤であるアルデヒドが銅(I)の第二配位圏で水素結合により活性化されて反応する姿が明らかになった。この研究を進める中で澤村と森はニトロンを求電子剤とする末端アルキンの銅反応により β ラクタムが生成する衣笠反応も同様の水素結合型反応機構で効率よく生成する可能性があることを着想した。森 G が行ったモデル系遷移状態の量子シミュレーションは、これを強く支持した。これに基づき澤村 G で実験を行ったところ、水素結合サイトに依存した不

斉衣笠反応が確認された。合成実験に基づく触媒の最適化により、極めて高いエナンチオ選択性が実現できた。フェニルアセチレン誘導体の不斉衣笠反応については、これまでにいくつかの報告例があるが、これまで困難であったアルキルアセチレンの反応においても高立体選択性が得られるようになった点が合成化学的見地からの本研究の大きな成果である。触媒との水素結合によってニトロンが活性化される点でも、既報の反応系とは異なっており興味深い。



Asymmetric Kinugasa Reaction



研究項目 3 C(sp²)-H 不斉付加反応の探索 (北大 澤村 G、茨城大 森 G、北大 武次 G)

①研究のねらい

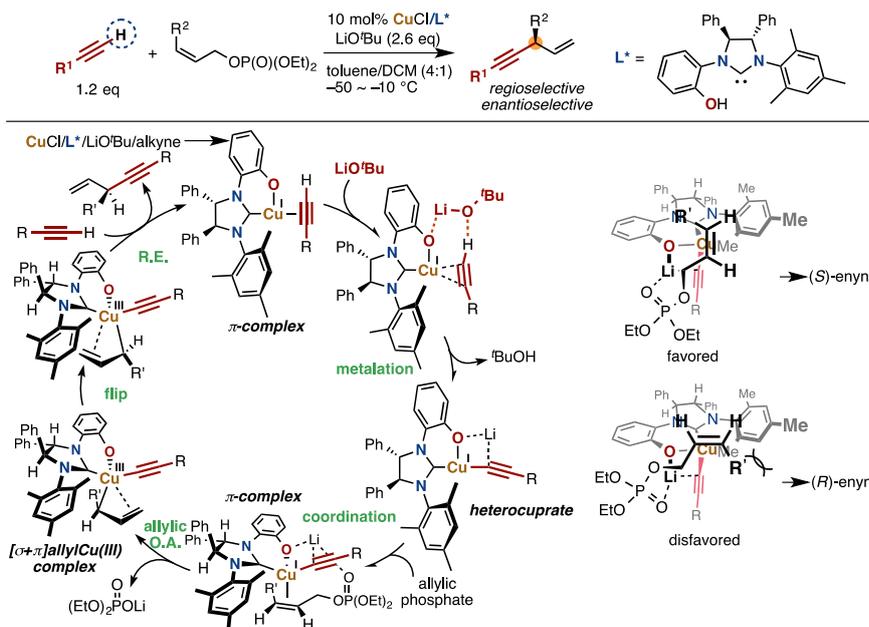
澤村 G は銅(I)触媒による末端アルキンの C(sp)-H 結合切断を経由する立体特異的アリル位アルキニル化反応を見出していた。本研究では、この成果を足がかりにして、新規 C(sp²)-H 付加反応を開発し、キラル配位子による不斉合成に展開することを目指した。遷移金属錯体による C(sp)-H 結合切断と不飽和結合への付加の原理を発展させて、C(sp²)-H 不斉付加を実現するものである。

②研究実施方法

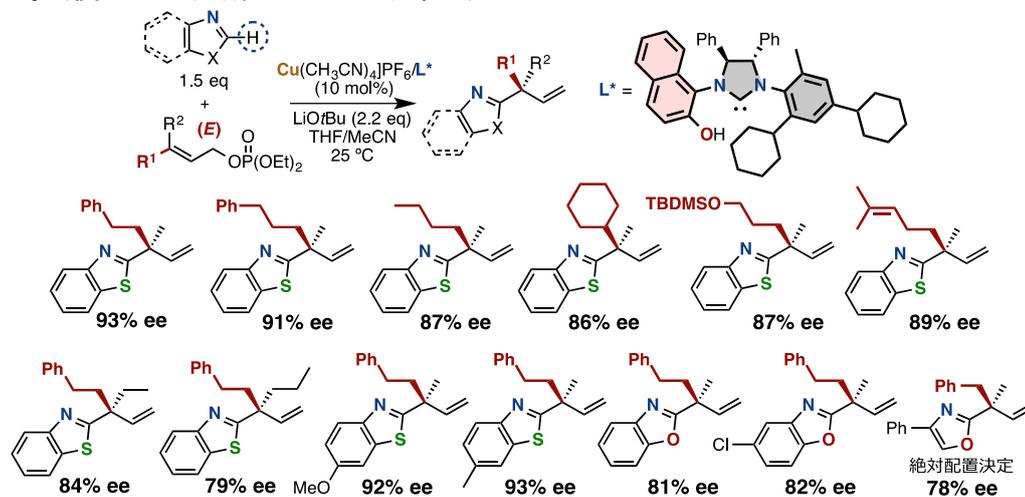
C(sp)-H または C(sp²)-H を活性化し、プロキラル不飽和化合物にエナンチオ選択的に付加または付加-脱離させる反応では、C-H 活性化の段階でエナンチオ区別は起こらず、生成した有機金属種がプロキラル不飽和種と反応する時にエナンチオ選択性が発現する。したがって、プロキラル不飽和化合物をキラル環境の中で効果的に捕捉してエナンチオ面を区別する必要がある。本研究では、プロキラル不飽和化合物の捕捉を必ずしも中心金属への配位結合によるのではなく、キラル配位子、補助因子 (コファクター)、および溶媒分子などが協同的に作り出すキラルな金属第 2 配位圏を利用して捕捉することを基本戦略とする。つまり遷移金属と有機分子の協同的触媒機構により C-H 活性化とともに高度なエナンチオ制御を実現する。C-H 活性化より先に、不飽和基質が金属に直接安定配位しないような反応経路を設定することで、C-H 活性化に必要な中心金属の空の配位座を確保する触媒設計戦略であり、極性不飽和化合物をプロキラル基質とする反応に対して特に効果的であると期待した。

③採択当初の研究計画(全体研究計画書)に対する研究達成状況(§ 2. と関連します)と得られた成果

〈末端アルキン C(sp)-H 結合のエナンチオ選択的 direct アリル化による 1,4-エンインの不斉合成〉
澤村 G はフェノール性水酸基を含む新規不斉 *N*-ヘテロ環カルベン (フェノール-NHC) 配位子を設計・合成し、その銅錯体を不斉触媒とする末端アルキンの第 1 級リン酸アリル類に対するエナンチオ選択的アリル位アルキル化反応を開発した。末端アルキンと第 1 級リン酸アリル基質の反応が、触媒量の塩化銅(I) (10 mol%)、フェノール-NHC 配位子前駆体 (12 mol%)、2.6 当量の LiOtBu 存在下、優れた位置 (分岐) 選択性およびエナンチオ選択性で進行した。これまで他の研究者が報告した類似反応は、アルキンを有機金属反応剤で事前活性化するものばかりであり、本研究は C(sp)-H 結合を直接活性化しながら不斉アリル化を初めて実現したものである。澤村 G が行った実験的反応機構解析の結果は、([σ+π]-allyl)copper(III) 中間体における Cu の 1,3-アリル転位を含むこと、不斉配位子中のフェノール性水酸基がイオン化して Li⁺イオンを補足する塩基点として機能すること、Li⁺イオンが協同的ルイス酸点として働くこと、これによりアルキニル置換反応が *anti* の立体化学で起こることなどを示唆した。これをふまえて、下記に示す触媒サイクルとエナンチオ選択性発現機構モを提案した。一方、武次 G は反応経路自動探索法による理論計算を行っている。今後、この理論計算の結果を出発点として、高機能触媒の開発と新反応の開拓を目指した量子シミュレーション研究を実施することを計画している。〈優れた基礎研究としての成果 2〉

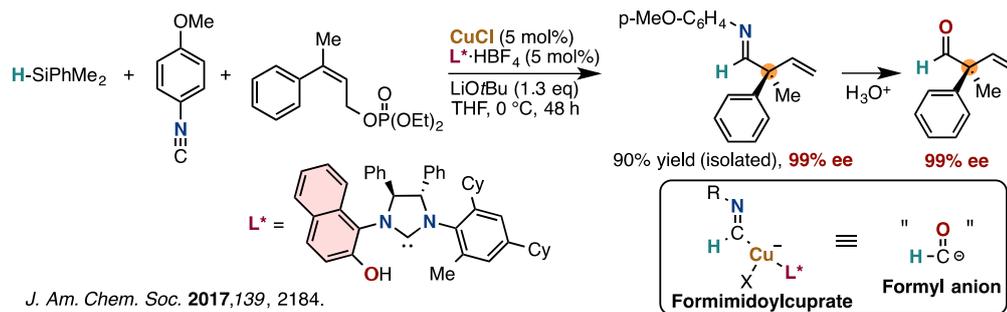


〈ヘテロアレーン $\text{C}(\text{sp}^2)\text{-H}$ 結合のエナンチオ選択的アシル化による第4級不斉炭素中心の構築〉 澤村 G は、上記「末端アルキン $\text{C}(\text{sp})\text{-H}$ のエナンチオ選択的アシル化に関する研究」の展開として「ヘテロアレーン $\text{C}(\text{sp}^2)\text{-H}$ のエナンチオ選択的アシル化」に成功した。つまり、末端アルキンの反応で用いていたフェノール型不斉 N -ヘテロ環カルベン配位子の構造改変と反応条件の最適化により、90% ee を超える高いエナンチオ選択性で全炭素置換4級不斉炭素中心を構築できるようになった。ヘテロアレーンに3級アルキル基をエナンチオ選択的に導入する手法はこれまで知られていない。第4級不斉炭素中心の構築に成功した点は、当初の想定を超える大きな成果である。〈優れた基礎研究としての成果2〉

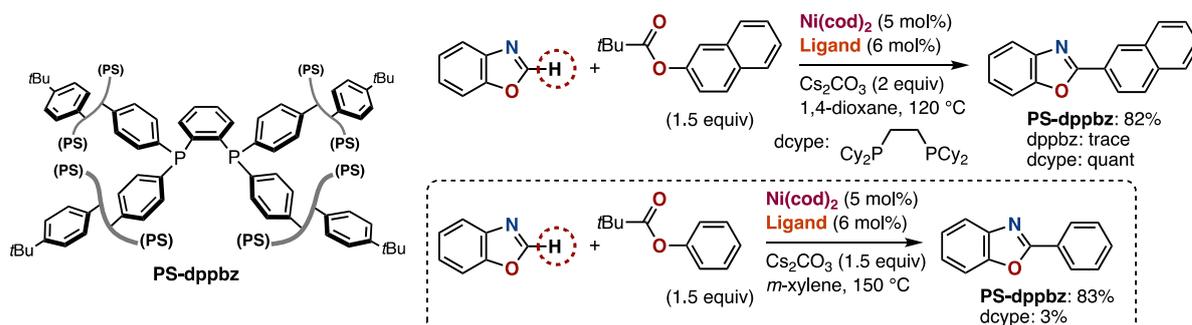


④当初計画では想定されていなかった新たな展開があった場合、その内容と展開状況と得られた成果

フェノール-NHC 配位子を用いた銅触媒不斉アリル位アルキル化の派生研究として銅触媒によるイソニトリル/ヒドロシラン/リン酸アリルエステルの不斉3成分カップリング反応を開発した。ホルムイミドイル銅種を求核剤とするアリル位アルキル化により α 位に第4級不斉炭素中心を持つホルムイミドやアルデヒドを合成する反応である。不斉配位子-LiO^tBu 会合体がヒドロシランをヒドロシリケートとして活性化し、求核的ヒドリドが銅に配位したイソニトリル炭素を攻撃する機構を提唱している。



澤村 G は、「固相多点担持ホスフィン基づく高活性不均一系触媒の創製」の新展開として、1,2-ビス（ジフェニルホスフィノ）ベンゼン（dppbz）を基本骨格とするポリスチレン四点架橋ビスホスフィン PS-dppbz を開発し、この固定化ニッケル触媒がアゾール類とフェノール誘導体の C-H/C-O カップリング反応に有効であることを見出した。本反応については、電子豊富かつ立体的に嵩高い 1,2-ビス（ジシクロヘキシルホスフィノ）エタン（dcype）配位子が特異的に有効であることが名古屋大学の伊丹らによって報告されている（K. Itami, *et al.* *JACS* **2012**, *134*, 169）。PS-dppbz が dcype に比べて電子供与能および立体的嵩高さの乏しいことにも関わらず、同カップリング反応が進行することは驚くべき結果である。対応する均一系配位子 dppbz では反応はほとんど進行しないことから、ビスホスフィン配位子の固定化が重要であることは明らかである。また、既存の均一系触媒ではほとんど反応性を示さない単環式フェノールエステルの反応も、PS-dppbz を用いることで効率よく進行し、C-H/C-O カップリング生成物が良好な収率で得られ、PS-dppbz の有用性が示された。このようにして高活性不均一系触媒の新たな設計指針を確立した。現在、光学活性配位子を高分子担体に組み込むことで、不斉 C-H 結合活性化に有効な触媒の開発することを目的に研究を行っている。



研究項目 4 不斉 C(sp³)-H 活性化反応の探索 (北大 澤村 G、茨城大 森 G、北大 武次 G)

①研究のねらい

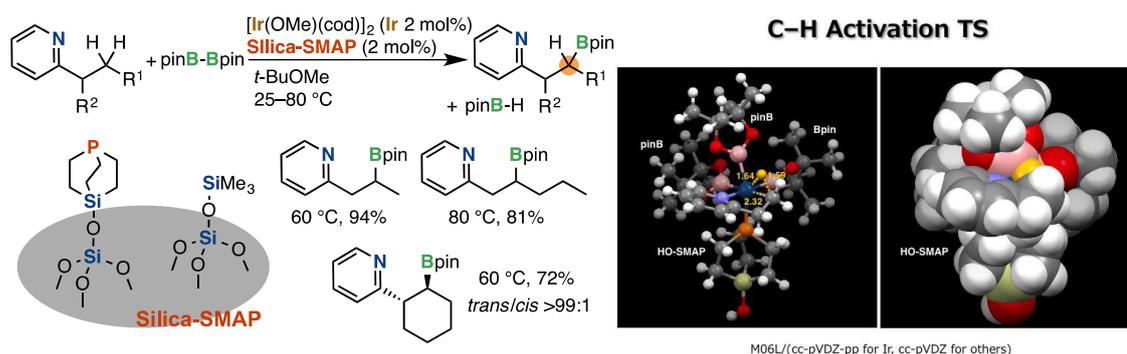
近年多様な C(sp²)-H 結合の官能基化反応が次々と報告されているのに対し、不活性 C(sp³)-H 結合の直接変換に関する研究例は極めて少ない。C(sp³)-H 結合の活性化が、C(sp²)-H 結合の活性化よりも難しいことを反映している。遷移金属と相互作用可能な隣接 π 軌道が存在せず、反応点の大きな立体障害もあいまって遷移金属が接近しづらいことが C(sp³)-H 結合の活性化を困難にしている。中でも不斉合成への展開で求められる第二級 C(sp³)-H 結合の活性化は、大きな立体障害から特に困難である。本 ACT-C 研究では、独自の触媒設計によって、第二級および第三級 C(sp³)-H 結合の触媒の活性化を実現すること、さらには量子シミュレーションを活用した触媒設計により効果的な不斉触媒系を創出し、不斉 C(sp³)-H 活性化反応を開発することを目指した。

②研究実施方法

澤村 G が開発したシリカ固定化かご型モノホスフィン Silica-SMAP は、剛直なホスフィンを剛直な固体表面に直接固定化することで、金属配位サイトであるリン原子の完全孤立化を実現できる特性を持っている。このような特性から Silica-SMAP は、高反応性の配位不飽和遷移金属化学種を発生させるのに有効である。澤村 G は ACT-C 研究以前に、Silica-SMAP を Rh 触媒による水素化やヒドロシリル化、Cu 触媒による共役ヒドロシリル化、Pd 触媒によるクロアレーンのクロスカップリング、Ir 触媒による官能基化アレーンのオルト位選択的 C(sp²)-H ホウ素化などに応用してきた。ACT-C 研究では、まず Silica-SMAP を用いた反応探索により不斉 C(sp³)-H 活性化反応に展開可能な反応を見出し、続いてこれを不斉触媒系に展開することとした。武次 G と森 G は、澤村 G が行う実験系の探索と並行して反応経路自動探索法を駆使した量子シミュレーションの探索を実施し、その結果を澤村 G の実験にフィードバックすることとした。

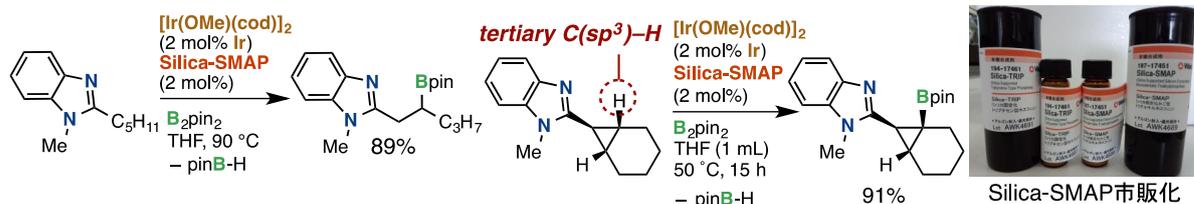
③採択当初の研究計画(全体研究計画書)に対する研究達成状況(§ 2. と関連します)と得られた成果

〈Silica-SMAP-Ir 触媒による不活性 C(sp³)-H ホウ素化反応の開発〉 澤村 G が開発した固相担持ホスフィン Silica-SMAP を配位子とする Ir 触媒の存在下で、単純アルキル基の C(sp³)-H 結合ホウ素化反応が、ピリジン等を配向基として位置選択的に進行することを見出した。第二級 C-H 結合のホウ素化にも有効である。この研究以前に報告されている第二級 C(sp³)-H 結合のホウ素化は溶媒分子の一部が反応した例に限られており、本触媒系の活性は顕著である。澤村 G と武次 G が共同して人工力誘起反応法(AFIR 法)に基づく反応経路自動探索を行い、反応機構と位置選択性を理論的に解明した。〈優れた基礎研究としての成果 1〉

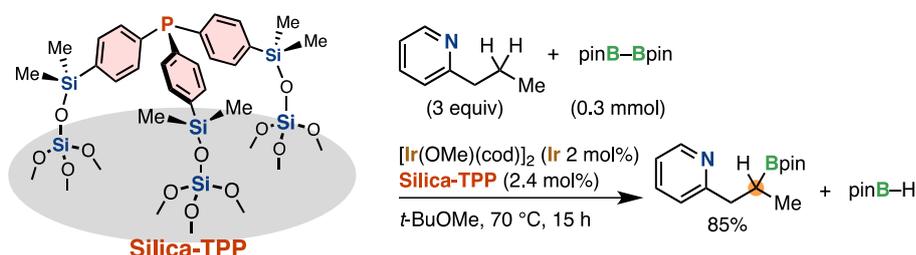


一方、澤村 G は、不活性 C(sp³)-H 結合ホウ素化反応の適用範囲の拡大も進め、配向基としてピリジンの代わりに変換可能な複素芳香環やイミン等を利用できることを明らかにした。またシクロプロパン環やシクロブタン環の C(sp³)-H ホウ素化が特に効率よく高立体選択的に進行することも見出し、前例のない第三級 C(sp³)-H 結合のホウ素化反応も温和な条件化可能であることを明らかにした。以下の図はその代表例である。以上のような研究成果により、Silica-SMAP の有用性

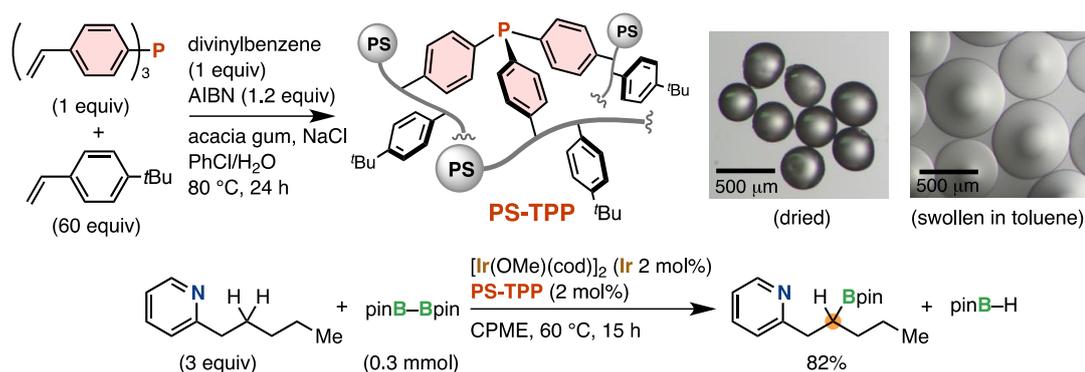
が広く知られることとなり、類縁体の Silica-TRIP とともに、和光純薬工業(株)から市販化されている。〈優れた基礎研究としての成果 1〉



澤村 G は、最も一般的なホスフィン配位子である Ph_3P を 3 点ケイ素修飾した分子をシリカ表面に三脚固定することによっても、Silica-SMAP のように金属-P 1:1 型錯体を選択的に形成する固相担持配位子が得られ、この 3 脚固定化ホスフィン配位子 Silica-TPP も不活性 $\text{C}(\text{sp}^3)\text{-H}$ 結合ホウ素化反応に有効であることを明らかにした。



シリカ 3 点固定化ホスフィンの優れた機能の発見をもとに、澤村 G は Ph_3P のポリスチレン(PS)鎖への 3 点担持による高活性金属-P 1:1 触媒の形成法を検討した。結果、トリス (4-ビニルフェニル) ホスフィン を 3 点架橋剤として PS 鎖を架橋することで新規高分子担持ホスフィン PS- Ph_3P を開発することに成功した。PS- Ph_3P は各種有機溶媒で良好に膨潤するビーズ状の樹脂であり、取扱い容易なソフトマテリアルである。合成は極めて容易であり、ホスフィン部位、高分子鎖ともに構造改変に対してフレキシブルである。PS- Ph_3P は Ir(Rh)触媒 $\text{C}(\text{sp}^3)\text{-H}$ ホウ素化の優れた配位子となった。PS 担体が化学的に非常に安定である。よって、PS- Ph_3P の開発成功は、固相担持法による高活性触媒創製研究の実用性を飛躍的に向上させたといえる。



§ 6. 成果発表等

(1)原著論文発表 【国内（和文）誌 0件、国際（欧文）誌 153件→152件に修正】

（本リストのうち No. 133 の論文が取り下げられたため、件数を修正するものです）

<欧文>

1. Yoshinori Shido, Mika Yoshida, Masahito Tanabe, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Copper-Catalyzed Enantioselective Allylic Substitution with Alkylboranes” *Journal of the American Chemical Society*, vol. 134, pp. 18573-18576, 2012. (DOI: 10.1021/ja3093955)
2. Soichiro Kawamorita, Kenji Yamazaki, Hirohisa Ohmiya, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura, “Conjugate Reduction of α,β -Unsaturated Carbonyl and Carboxyl Compounds with Poly(methylhydrosiloxane) Catalyzed by a Silica-Supported Compact Phosphane-Copper Complex”, *Advanced Synthesis & Catalysis*, vol. 354, pp. 3440-3444, 2012. (DOI: 10.1002/adsc.201200555)
3. Yu Harabuchi, Akira Nakayama, and Tetsuya Taketsugu, “Trifurcation of the Reaction Pathway”, *Computational and Theoretical Chemistry*, vol. 1000, pp. 70-74, 2012. (DOI: 10.1016/j.comptc.2012.09.024)
4. Xue-fang Yu, Shohei Yamazaki, and Tetsuya Taketsugu, “Theoretical study on water-mediated excited-state multiple proton transfer in 7-azaindole: Significance of hydrogen bond rearrangement”, *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 116, pp. 10566-10573, 2012. (DOI: 10.1021/jp308535h)
5. Min Gao, Andrey Lyalin, and Tetsuya Taketsugu, “CO oxidation on h-BN supported Au atom”, *Journal of Chemical Physics*, vol. 138, pp. 034701-034708, 2013. (DOI: 10.1063/1.4774216)
6. Atsushi Inoue, Makoto Kanematsu, Seiji Mori, Masahiro Yoshida and Kozo Shishido, “An Efficient Access to Aspermytin A and Oblongolide C through an Intermolecular Nitrile Oxide-Alkene [3+2] Cycloaddition”, *Synlett*, vol. 24, pp. 61-64, 2013 (DOI: 10.1055/s-0032-1317693)
7. Hideto Ito, Ayumi Harada, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Use of a Semihollow-Shaped Triethynylphosphane Ligand for Efficient Formation of Six- and Seven-Membered Ring Ethers through Gold(I)-Catalyzed Cyclization of Hydroxy-Tethered Propargylic Esters”, *Advanced Synthesis & Catalysis*, vol. 355, pp. 647-652, 2012. (DOI: 10.1002/adsc.201200949)
8. Soichiro Kawamorita, Ryo Murakami, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura, “Synthesis of Primary and Secondary Alkylboronates through Site-Selective C(sp³)-H Activation with Silica-Supported Monophosphine-Ir Catalysts”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 135, pp. 2947-2950, 2013. (DOI: 10.1021/ja3126239)
9. Andrey Lyalin, Akira Nakayama, Kohei Uosaki, and Tetsuya Taketsugu, “Theoretical Prediction for Hexagonal BN Based Nanomaterials as Electrocatalyst for Oxygen Reduction Reaction”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 15, pp. 2809-2820, 2013. (DOI: 10.1039/C2CP42907A)
10. Bina Fu, Joel M Bowman, Hongyan Xiao, Satoshi Maeda, and Keiji Morokuma, “Quasiclassical Trajectory Studies of the Photodissociation Dynamics of NO₃ from the D₀ and D₁ Potential Energy Surfaces”, *Journal of Chemical Theory and Computations*, vol. 9, pp. 893-900, 2013. (DOI: 10.1021/ct3009792)
11. Hongyan Xiao, Satoshi Maeda, and Keiji Morokuma, “CASPT2 Study of Photodissociation Pathways of Ketene”, *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 117, pp. 7001-7008, 2013 (DOI: 10.1021/jp312719a)
12. Tomohiro Iwai, Hiori Okochi, Hideto Ito, and Masaya Sawamura, “Construction of Eight-Membered Carbocycles via Gold Catalysis with Acetylene-Tethered Silyl Enol Ethers”, *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 52, pp. 4239-4242, 2013. (DOI: 10.1002/anie.201300265)
13. Satoshi Maeda, Koichi Ohno, and Keiji Morokuma, “Systematic Exploration of the Mechanism of Chemical Reactions: Global Reaction Route Mapping (GRRM) Strategy by the ADDF and AFIR Methods”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 15, pp. 3683-3701, 2013. (DOI: 10.1039/C3CP44063J)
14. Nicole F. Allard, Akira Nakayama, Fernand Spiegelman, John F. Kielkopf, and Frank Stienkemeier, “Absorption spectra of Na atoms in dense He”, *The European Physical Journal D*, vol. 67, pp. 52-59, 2013. (DOI: 10.1140/epjd/e2013-30523-x)
15. P. S. Krstic, J. P. Allain, C. N. Taylor, J. Dadras, S. Maeda, K. Morokuma, J. Jakowski, A. Allouche, and C. H. Skinner, “Deuterium Uptake in Magnetic-fusion Devices with Lithium-conditioned Carbon Walls”, *Physical Review Letters*, vol. 110, pp. 105001-105005, 2013. (DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.105001)
16. Yu Harabuchi, Moe Ishii, Akira Nakayama, Takeshi Noro, and Tetsuya Taketsugu, “A multireference perturbation study of the NN stretching frequency of trans-azobenzene in $n\pi^*$ excitation and an implication for the photoisomerization mechanism,” *Journal of Chemical Physics*, vol. 138, pp. 064305-064311, 2013. (DOI: 10.1063/1.4790611)

17. Yusuke Makida, Yurie Takayama, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Copper-Catalyzed γ -Selective and Stereospecific Direct Allylic Alkylation of Terminal Alkynes: Synthesis of Skipped Enynes", *Angewandte Chemie, International Edition*, vol. 52, pp. 5350-5354, 2013. (DOI: 10.1002/anie.201300785)
18. Takeshi Matsumoto, Ho-Chol Chang, Masanori Wakizaka, Sho Ueno, Atsushi Kobayashi, Akira Nakayama, Tetsuya Taketsugu, and Masako Kato, "Nonprecious-metal-assisted Photochemical Hydrogen Production from ortho-Phenylenediamine", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 135, pp. 8646-8654, 2013. (DOI: 10.1021/ja4025116)
19. Tomohiro Iwai, Yuki Akiyama and Masaya Sawamura, "Synthesis of a Chiral *N*-Heterocyclic Carbene Bearing a *m*-Terphenyl-Based Phosphate Moiety as an Anionic *N*-Substituent and Its Application to Copper-Catalyzed Enantioselective Boron Conjugate Addition", *Tetrahedron: Asymmetry*, vol. 24, pp. 729-735, 2013 (DOI: 10.1016/j.tetasy.2013.05.013).
20. Miho Hatanaka, Satoshi Maeda, and Keiji Morokuma, "Sampling of Transition States for Predicting Diastereoselectivity Using Automated Search Method—Aqueous Lanthanide-Catalyzed Mukaiyama Aldol Reaction", *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 9, pp. 2882-2886, 2013. (DOI: 10.1021/ct4002637)
21. Hongyan Xiao, Satoshi Maeda and Keiji Morokuma, "Theoretical Study on the Photodissociation of Methylamine Involving S_1 , T_1 , and S_0 States", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 117, pp. 5757-5764, 2013. (DOI: 10.1021/jp4042952)
22. Akira Nakayama, Yu Harabuchi, Shohei Yamazaki, and Tetsuya Taketsugu, "Photophysics of Cytosine Tautomers: New Insights into the Nonradiative Decay Mechanisms from MS-CASPT2 Potential Energy Calculations and Excited-state Molecular Dynamics Simulations", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 15, pp. 12322-12339, 2013. (DOI: 10.1039/C3CP51617B)
23. Yu Harabuchi, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, Noriyuki Minezawa, and Keiji Morokuma, "Automated search for minimum energy conical intersection geometries between the lowest two singlet states S_0/S_1 -MECIs by the spin-flip TDDFT method", *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 9, pp. 4116-4123, 2013. (DOI: 10.1021/ct400512u)
24. Takaoki Ishii, Ryo Watanabe, Toshimitsu Moriya, Hirohisa Ohmiya, Seiji Mori, and Masaya Sawamura, "Cooperative Catalysis of Metal and O-H...O/ sp^3 -C-H...O Two-point Hydrogen Bonds in Alcoholic Solvents: Copper-catalyzed Enantioselective Direct Alkynylation of Aldehydes with Terminal Alkynes", *Chemistry – A European Journal*, vol. 19, pp. 13547-13553, 2013. (DOI: 10.1002/chem.201301280)
25. Yutaka Matsuo, Yoichiro Kuninobu, Shingo Ito, Masaya Sawamura, and Eiichi Nakamura, "Friedel-Crafts Functionalization of Cyclopentadienyl Ligand in Bucky Metalloenes", *Dalton Transactions*, vol. 43, pp. 7407-7412, 2014 (DOI: 10.1039/c3dt52002a)
26. Andrey Lyalin, Akira Nakayama, Kohei Uosaki, and Tetsuya Taketsugu, "Functionalization of h-BN Monolayer by the Metal Support for Oxygen Reduction Reaction", *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 117, pp 21359-21370, 2013. (DOI: 10.1021/jp406751n)
27. Takamichi Wakamatsu, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Synthesis of Trisubstituted Alkenylstannanes through Copper-Catalyzed Three-Component Coupling with Alkylboranes, Alkynoates, and Tributyltin Methoxide", *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 52, pp. 11620-11623, 2013. (DOI: 10.1002/anie.201305973)
28. Tomohiro Iwai, Tomoya Harada, Kenji Hara, and Masaya Sawamura, "Threefold Cross-Linked Polystyrene-Triphenylphosphane Hybrids: Mono-P-Ligating Behaviors and Catalytic Applications for Aryl Chloride Cross-Coupling and $C(sp^3)$ -H Borylation", *Angewandte Chemie, International Edition*, vol. 52, pp. 12322-12326, 2013. (DOI: 10.1002/anie.201306769)
29. Yu Harabuchi, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Koichi Ohno, "Direct Pathway for Water-Gas Shift Reaction in Gas Phase", *Chemistry Letters*, vol. 43, pp. 193-195, 2014. (DOI: 10.1246/cl.130940)
30. Wen Piao, Satoru Tsuda, Yuji Tanaka, Satoshi Maeda, Fengyi Liu, Shodai Takahashi, Yu Kushida, Toru Komatsu, Tasuku Ueno, Takuya Terai, Toru Nakazawa, Masanobu Uchiyama, Keiji Morokuma, Tetsuo Nagano, and Kenjiro Hanaoka, "Development of a New Class of Azo-based Fluorescence Probes to Detect Different Levels of Hypoxia", *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 52, pp. 13028-13032, 2013. (DOI: 10.1002/anie.201305784)
31. Akira Nakayama, Gaku Arai, Shohei Yamazaki, and Tetsuya Taketsugu, "Solvent effects on the ultrafast nonradiative deactivation mechanisms of thymine in aqueous solution: Excited-state QM/MM molecular dynamics simulations", *The Journal of Chemical Physics*, vol. 139, pp. 214304, 2013. (DOI: 10.1063/1.4833563)
32. Keisuke Niimi, Akira Nakayama, Yuriko Ono, and Tetsuya Taketsugu, "Vibrational Shifts of HXeCl in Matrix Environments", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 118, pp. 380-387, 2014. (DOI: 10.1021/jp406751n)

- 10.1021/jp411298p)
33. Tomohiro Iwai, Ryotaro Tanaka, Tomoya Harada, and Masaya Sawamura, "Tripod Immobilization of Triphenylphosphane on a Silica Gel Surface to Enable Selective Mono-P-igation to Palladium: Application to Suzuki–Miyaura Cross-Coupling with Chloroarenes", *Chemistry – A European Journal*, vol. 20, pp. 1057-1065, 2014. (DOI: 10.1002/chem.201304081)
 34. Tomohiro Iwai, Tomoya Harada, Ryotaro Tanaka, and Masaya Sawamura, "Silica-supported Tripod Triarylphosphines: Application to Palladium Catalyzed Borylation of Chloroarenes", *Chemistry Letters*, vol. 43, pp. 584-586, 2013. (DOI: 10.1246/cl.131161)
 35. Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Keiji Morokuma, "Exploring Transition State Structures for Intramolecular Pathways by the Artificial Force Induced Reaction (AFIR) Method", *Journal of Computational Chemistry*, vol. 35, pp. 166-173, 2014. (DOI: 10.1002/jcc.23481)
 36. Ryohei Uematsu, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu, "Multiple Reaction Pathways Operating in the Mechanism of Vinylogous Mannich-type Reaction Activated by a Water Molecule", *Chemistry – An Asian Journal*, Vol. 9, pp. 305-312, 2014. (DOI: 10.1002/asia.201301065)
 37. Shohei Yamazaki, Shu-hei Urashima, Hiroyuki Saigusa, and Tetsuya Taketsugu, "Ab Initio Studies on the Photophysics of Uric Acid and Its Monohydrates: Role of the Water Molecule", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 118, pp. 1132-1141, 2014. (DOI: 10.1021/jp411880z)
 38. Shota Konishi, Soichiro Kawamorita, Tomohiro Iwai, Patrick G. Steel, Todd, B. Marder, and Masaya Sawamura, "Site-selective C–H Borylation of Quinolines at the C-8 Position Catalyzed by a Silica-supported Phosphane-Iridium System", *Chemistry – An Asian Journal*, vol. 9, pp. 434-438, 2014. (DOI: 10.1002/asia.201301423)
 39. Miho Isegawa, Satoshi Maeda, Dean J. Tantillo, and Keiji Morokuma, "Predicting pathways for terpene formation from first principles – routes to known and new sesquiterpenes", *Chemical Science*, vol. 5, pp. 1555-1560, 2014. (DOI: 10.1039/C3SC53293C)
 40. Hiroaki Tokoyama, Hideo Yamakado, Satoshi Maeda, and Koichi Ohno, "Exploration of Isomers of Benzene by GRRM/SCC-DFTB", *Chemistry Letters*, vol. 43, pp. 702-704, 2014. (DOI: 10.1246/cl.140024)
 41. Andrey Lyalin, Akira Nakayama, Kohei Uosaki, and Tetsuya Taketsugu, "Adsorption and Catalytic Activation of the Molecular Oxygen on the Metal Supported h-BN", *Topics in Catalysis*, vol. 57, pp. 1032-1041, 2014. (DOI: 10.1007/s11244-014-0267-7)
 42. Kentaro Hojoh, Yoshinori Shido, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Construction of Quaternary Stereogenic Carbon Centers through Copper-Catalyzed Enantioselective Allylic Cross-Coupling with Alkylboranes", *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 126, pp. 5054-5058, 2014. (DOI: 10.1002/ange.201402386)
 43. Yasuhiro Okuda, Yuya Ishiguro, Seiji Mori, Kiyohiko Nakajima, and Yasushi Nishihara, "Experimental and Theoretical Studies on the Platinum-Mediated Selective C(sp)–Si Bond Cleavage of Alkynylsilanes", *Organometallics*, vol. 33, pp. 1878-1889, 2014. (DOI: 10.1021/om5002588)
 44. Guixiang Zeng, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Shigeyoshi Sakaki, "Catalytic Transfer Hydrogenation by a Trivalent Phosphorus Compound: Phosphorus-Ligand Cooperation Pathway or PIII/PV Redox Pathway?", *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 53, pp. 4633-4637, 2014. (DOI: 10.1002/anie.201311104)
 45. Kohei Uosaki, Ganesan Elumalai, Hidenori Noguchi, Takuya Masuda, Andrey Lyalin, Akira Nakayama, and Testuya Taketsugu, "Boron nitride nanosheet on gold as an electrocatalyst for oxygen reduction reaction – Theoretical suggestion and experimental proof", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 136, pp. 6542-6545, 2014 (DOI: 10.1021/ja500393g)
 46. Hirotaka Kinuta, Hiroaki Takahashi, Mamoru Tobisu, Seiji Mori, and Naoto Chatani, "Theoretical Studies of Rhodium-Catalyzed Borylation of Nitriles through Cleavage of Carbon–Cyano Bonds", *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, vol. 87, pp. 655-669, 2014. (DOI: 10.1246/bcsj.20130332)
 47. Yasuhiro Okuda, Robert K Szilagy, Seiji Mori, and Yasushi Nishihara, "The Origin of Exo-Selectivity in Methyl Cyanofornate Addition onto the C=C Bond of Norbornene in Pd-Catalyzed Cyanoesterification", *Dalton Transactions*, vol. 43, pp. 9537-9548, 2014. (DOI: 10.1039/C4DT00839A)
 48. Tomohiro Iwai, Ryo Murakami, Tomoya Harada, Soichiro Kawamorita, and Masaya Sawamura, "Silica-Supported Tripod Triarylphosphane: Application to Transition Metal Catalyzed C(sp³)–H Borylations", *Advanced Synthesis & Catalysis*, vol. 356, pp. 1563-1570, 2014. (DOI: 10.1002/adsc.201301147)
 49. Ayumu Makida, Hironori Igarashi, Takehisa Fujiwara, Taro Sekikawa, Yu Harabuchi, and Tetsuya Taketsugu, "Ultrafast Relaxation Dynamics in trans-1,3-Butadiene Studied by Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy with High Harmonic Pulses", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 5, pp. 1760-1765, 2014. (DOI: 10.1021/jz5003567)

50. June Takaichi, Yuma Morimoto, Kei Ohkubo, Chizu Shimokawa, Takayuki Hojo, Seiji Mori, Haruyasu Asahara, Hideki Sugimoto, Nobutaka Fujieda, Nagatoshi Nishiwaki, Shunichi Fukuzumi, and Shinobu Itoh, "Redox Chemistry of Nickel (II) Complexes Supported by a Series of Noninnocent β -Diketiminato Ligands", *Inorganic Chemistry*, vol. 53, pp. 6159-6169, 2014. (DOI: 10.1021/ic5006693)
51. Tuanjai Somboon, Jun Ochiai, Witcha Treesuwan, M Paul Gleeson, Supa Hannongbua, and Seiji Mori, "Mechanistic insights into the catalytic reaction of plant allene oxide synthase (pAOS) via QM and QM/MM calculations", *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, vol. 52, pp. 20-29, 2014. (DOI: 10.1016/j.jmgm.2014.05.012)
52. Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Phosphine-Catalyzed Anti-Carboboration of Alkynoates with Alkyl-, Alkenyl-, and Arylboranes", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 136, pp. 10605-10608, 2014. (DOI: 10.1021/ja506310v)
53. Takahiro Ohkawara, Kohei Suzuki, Koji Nakano, Seiji Mori, and Kyoko Nozaki, "Facile Estimation of Catalytic Activity and Selectivities in Copolymerization of Propylene Oxide with Carbon Dioxide Mediated by Metal Complexes with Planar Tetradentate Ligand", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 136, pp. 10728-10735, 2014. (DOI: 10.1021/ja5046814)
54. Ryo Murakami, Kiyoshi Tsunoda, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura, "Stereoselective C-H Borylations of Cyclopropanes and Cyclobutanes with Silica-supported Monophosphane-Ir Catalysts", *Chemistry – A European Journal*, vol. 20, pp. 13127-13131, 2014. (DOI: 10.1002/chem.201404362)
55. Ayumi Harada, Yusuke Makida, Tatsunori Sato, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Copper-Catalyzed Enantioselective Allylic Alkylation of Terminal Alkyne Pronucleophiles", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 136, pp. 13932-13939, 2014. (DOI: 10.1021/ja5084333)
56. Akira Nakayama, Shohei Yamazaki, and Tetsuya Taketsugu, "Quantum Chemical Investigations on the Nonradiative Deactivation Pathways of Cytosine Derivatives", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 118, pp. 9429-9437, 2014. (DOI: 10.1021/jp506740r)
57. Yu Harabuchi, Kristopher Keipert, Federico Zahariev, Tetsuya Taketsugu, and Mark S. Gordon, "Dynamics Simulations with Spin-Flip Time-Dependent Density Functional Theory: Photoisomerization and Photocyclization Mechanisms of cis-Stilbene in $\pi\pi^*$ States", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 118, pp. 11987-11998, 2014. (DOI: 10.1021/jp5072428)
58. Satoshi Maeda, Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, and Keiji Morokuma, "Systematic Exploration of Minimum Energy Conical Intersection Structures near the Franck-Condon Region", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 118, pp. 12050-12058, 2014. (DOI: 10.1021/jp507698m)
59. Jing Li, Yasuhiro Okuda, Jiayi Zhao, Seiji Mori, and Yasushi Nishihara, "Skeletal Rearrangement of Cyano-Substituted Iminoisobenzofurans into Alkyl 2-Cyanobenzoates Catalyzed by $B(C_6F_5)_3$ ", *Organic Letters*, vol. 16, pp. 5220-5223, 2014. (DOI: 10.1021/ol5026519)
60. Kosuke Namba, Ayumi Osawa, Akira Nakayama, Akane Mera, Fumi Tano, Yoshiro Chuman, Eri Sakuda, Tetsuya Taketsugu, Kazuyasu Sakaguchi, Noboru Kitamura, and Keiji Tanino, "Synthesis of Yellow and Red Fluorescent 1,3a,6a-Triazapentalene and Theoretical Investigation of Optical Properties", *Chemical Science*, vol. 6, pp. 1083-1093, 2015. (DOI: 10.1039/C4SC02780A)
61. Ahmed M. El-Nahas, John M. Simmie, Ahmed H. Mangood, Kimihiko Hirao, Jong-Won Song, Mark A. Watson, Tetsuya Taketsugu, and Nobuaki Koga, "Assessment of Density Functionals for the Estimation of Enthalpies of Formation, Barrier Heights, and Ionization Potentials of Selected C1-C5 Oxygenates", *Molecular Physics*, vol. 113, pp. 1630-1635, 2015. (DOI: 10.1080/00268976.2014.1002552)
62. Cheng Zhu, Keisuke Niimi, Tetsuya Taketsugu, Masashi Tsuge, Akira Nakayama, and Leonid Khriachtchev, "HXeI and HXeH in Ar, Kr, and Xe Matrices: Experiment and Simulation", *The Journal of Chemical Physics*, vol. 142, p. 054305, 2015 (DOI: 10.1063/1.4906875)
63. Min Gao, Andrey Lyalin, Makito Takagi, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu, "Reactivity of Gold Clusters in the Regime of Structural Fluxionality", *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 119, pp. 11120-11130, 2015. (DOI: 10.1021/jp511913t)
64. Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Anti-Selective Vicinal Silaboration and Diboration of Alkynoates through Phosphine Organocatalysis", *Organic Letters*, vol. 17, pp. 1304-1307, 2015. (DOI: 10.1021/acs.orglett.5b00305)
65. Keisuke Niimi, Tetsuya Taketsugu, and Akira Nakayama, "Matrix site effects on vibrational frequencies of HXeCCH, HXeBr, and HXeI: a hybrid quantum-classical simulation", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 17, pp. 7872-7880, 2015. (DOI: 10.1039/C5CP00568J)
66. Ryohei Uematsu, Eiji Yamamoto, Satoshi Maeda, Hajime Ito, and Tetsuya Taketsugu, "Reaction Mechanism of the Anomalous Formal Nucleophilic Borylation of Organic Halides with Silylborane: Combined Theoretical and Experimental Studies", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 137, pp. 4090-4099, 2015. (DOI: 10.1021/ja507675f)

67. Hiroaki Murayama, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Copper(I)-Catalyzed Intramolecular Hydroalkoxylation of Unactivated Alkenes", *Organic Letters*, vol. 17, pp. 2039-2041, 2015 (DOI: 10.1021/acs.orglett.5b00758)
68. Yuto Yasuda, Kazunori Nagao, Yoshinori Shido, Seiji Mori, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Copper-Catalyzed γ -Selective and Stereospecific Allylic Cross-Coupling with Secondary Alkylboranes", *Chemistry – A European Journal*, vol. 21, pp. 9666-9670, 2015. (DOI: 10.1002/chem.201501055)
69. Kentaro Hojoh, Yoshinori Shido, Kazunori Nagao, Seiji Mori, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Copper-catalyzed enantioselective allylic cross-coupling with alkylboranes", *Tetrahedron*, vol. 71, pp. 6519-6533. (DOI: 10.1016/j.tet.2015.05.048)
70. Ryo Iikubo, Takehisa Fujiwara, Taro Sekikawa, Yu Harabuchi, Sota Satoh, Tetsuya Taketsugu, and Yosuke Kayanuma, "Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Dissociating 1,2-Butadiene Molecules by High Harmonic Pulses", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 6, pp. 2463-2468, 2015. (DOI: 10.1021/acs.jpcclett.5b00943)
71. Yu Harabuchi, Yuriko Ono, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu, "Analyses of bifurcation of reaction pathways on a global reaction route map: a case study of gold cluster Au₅", *The Journal of Chemical Physics*, vol. 143, p. 014301, 2015. (DOI: 10.1063/1.4923163)
72. Hiroaki Tokoyama, Hideo Yamakado, Satoshi Maeda, and Koichi Ohno, "Isomers of Benzene on Its Global Network of Reaction Pathways", *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, vol. 88, pp. 1284-1290, 2015. (DOI: 10.1246/bcsj.20150088)
73. Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda, "Exploration of Minimum Energy Conical Intersection Structures of Small Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Impact on the Size Dependence of Fluorescence Quantum Yields", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 17, pp. 22561-22565, 2015. (DOI: 10.1039/C5CP02103K)
74. Masato Kobayashi and Tetsuya Taketsugu, "Second-Order Møller-Plesset Perturbation (MP2) Theory at Finite Temperature: Relation with Surján's Density Matrix MP2 and Its Application to Linear-Scaling Divide-and-Conquer Method", *Theoretical Chemistry Accounts*, vol. 134, p. 107, 2015. (DOI: 10.1007/s00214-015-1710-y)
75. Masato Kobayashi, Yusuke Kuroda, Kin-ya Akiba, and Tetsuya Taketsugu, "Theoretical Study on the Ligand Coupling Reaction of Hypervalent Pentacoordinate Antimony Compounds", *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, vol. 88, pp. 1584-1590, 2015. (DOI: 10.1246/bcsj.20150231)
76. Konstantin A. Simonov, Nikolay A. Vinogradov, Alexander S. Vinogradov, Alexander V. Generalov, Elena M. Zagrebina, Gleb I. Svirskiy, Attilio A. Cafolla, Tomas Carpy, John P. Cunniffe, Tetsuya Taketsugu, Andrey Lyalin, Nils Mårtensson, and Alexei B. Preobrajenski, "From Graphene Nanoribbons on Cu (111) to Nanographene on Cu (110): Critical Role of Substrate Structure in the Bottom-Up Fabrication Strategy", *ACS NANO*, vol. 9, pp. 8997-9011, 2015. (DOI: 10.1021/acsnano.5b03280)
77. Kei Yanagisawa, Takayuki Nakanishi, Yuichi Kitagawa, Tomohiro Seki, Tomoko Akama, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu, Hajime Ito, Koji Fushimi, and Yasuchika Hasegawa, "Seven-Coordinate Luminophores: Brilliant Luminescence of Lanthanide Complexes with C_{3v} Geometrical Structures", *The European Journal of Inorganic Chemistry*, vol. 2015, pp. 4769-4774, 2015. (DOI: 10.1002/ejic.201500820)
78. Adeel Jamal, Keiji Morokuma, Mikhail Ryazantsev, and Satoshi Maeda, "Global Investigation of Potential Energy Surfaces for the Pyrolysis of C1-C3 Hydrocarbons: Toward the Development of Detailed Kinetic Models from First Principles", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 17, pp. 27789-27805, 2015. (DOI: 10.1039/C5CP04329H)
79. Tomohiro Iwai, Yuki Akiyama, Kiyoshi Tsunoda, and Masaya Sawamura, "Synthesis and Structures of a Chiral Phosphine-Phosphoric Acid Ligand and its Rhodium(I) Complexes", *Tetrahedron: Asymmetry*, vol. 26, pp. 1245-1250, 2015. (DOI: 10.1016/j.tetasy.2015.09.016)
80. Tomohiro Iwai, Shota Konishi, Tatsuya Miyazaki, Soichiro Kawamorita, Natsumi Yokokawa, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Silica-Supported Triptycene-Type Phosphine. Synthesis, Characterization, and Application to Pd-Catalyzed Suzuki-Miyaura Cross-Coupling of Chloroarenes", *ACS Catalysis*, vol. 5, pp. 7254-7264, 2015. (DOI: 10.1021/acscatal.5b00904)
81. Satoshi Suzuki, Satoshi Maeda, and Keiji Morokuma, "Exploration of Quenching Pathways of Multiluminescent Acenes Using the GRRM Method with the SF-TDDFT Method", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 119, pp. 11479-11487, 2015. (DOI: 10.1021/acs.jpca.5b07682)
82. Yu Harabuchi, Yuriko Ono, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, Kristopher Keipert, and Mark S. Gordon, "Nontotally Symmetric Trifurcation of an S_N2 Reaction Pathway", *Journal of Computational Chemistry*, vol. 37, pp. 487-493, 2016. (DOI: 10.1002/jcc.24241)
83. Akira Morinaga, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Synthesis of 1,1-Diborylalkenes through a Brønsted Base Catalyzed Reaction between Terminal Alkynes and

- Bis(pinacolato)diboron”, *Angewante Chemie International Edition*, vol. 54, pp.15859–15862, 2015. (DOI: 10.1002/anie.201509218)
84. Yu Harabuchi, Yuriko Ono, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu, “Response to “Comment on ‘Analyses of bifurcation of reaction pathways on a global reaction route map: A case study of gold cluster Au₅’””, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 143, p. 177102, 2015. (DOI: 10.1063/1.4935182)
 85. Yosuke Sumiya, Yutaka Nagahata, Tamiki Komatsuzaki, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda, “Kinetic Analysis for the Multistep Profiles of Organic Reactions: Significance of the Conformational Entropy on the Rate Constants of the Claisen Rearrangement”, *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 119, pp. 11641–11649, 2015. (DOI: 10.1021/acs.jpca.5b09447)
 86. Daniel Murdock, Rebecca A. Ingle, Igor V. Sazanovich, Ian P. Clark, Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, Satoshi Maeda, Andrew J. Orr-Ewing, and Michael N. R. Ashfold, “Contrasting ring-opening propensities in UV-excited α -pyrone and coumarin”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 18, pp. 2629–2638, 2016. (DOI: 10.1039/C5CP06597F)
 87. Yutaka Nagahata, Satoshi Maeda, Hiroshi Teramoto, Takashi Horiyama, Tetsuya Taketsugu, and Tamiki Komatsuzaki, “Deciphering Time Scale Hierarchy in Reaction Networks”, *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 120, pp. 1961–1971, 2016. (DOI: 10.1021/acs.jpbc.5b09941)
 88. Jun Kawano, Satoshi Maeda, and Takaya Nagai, “Effect of Mg²⁺ Incorporation on the Structure of Calcium Carbonate Clusters: Investigation by the Anharmonic Downward Distortion Following Method”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 18, pp. 2690–2698, 2016. (DOI: 10.1039/C5CP05139H)
 89. Kazuhiro Akutsu, Seiji Mori, Kenichi Shinmei, Hiroki Iwase, Yoshiharu Nakano, and Yuki Fujii, “Investigation of Substitution Effect on Fluorescence Properties of Zn²⁺-Selective Ratiometric Fluorescent Compounds: 2-(2'-Hydroxyphenyl)benzimidazole Derivatives”, *Talanta*, vol. 146, pp. 575–584, 2016. (DOI: 10.1016/j.talanta.2015.09.001)
 90. Yuriko Ono, Yusuke Kondo, Masato Kobayashi, and Tetsuya Taketsugu, “Spin-orbit coupling effects on low-lying electronic states of PtCN/PtNC and PdCN/PdNC”, *Chemistry Letters*, vol. 45, pp. 478–480, 2016. (DOI: 10.1246/cl.151210)
 91. Hirohisa Ohmiya, Heng Zhang, Saori Shibata, Ayumi Harada, and Masaya Sawamura, “Construction of Quaternary Stereogenic Carbon Centers through Copper-Catalyzed Enantioselective Allylic Alkylation of Azoles”, *Angewante Chemie International Edition*, vol. 55, pp.4777–4780, 2016. (DOI: 10.1002/anie.201600619)
 92. Hiroaki Murayama, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Phosphine-Catalyzed Vicinal Acylcyanation of Alkynoates”, *Organic Letter*, vol. 18, pp. 1706–1709, 2016. (DOI: 10.1021/acs.orglett.6b00677)
 93. Takamichi Wakamatsu, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Copper-Catalyzed Semihydrogenation of Internal Alkynes with Molecular Hydrogen”, *Organometallics*, vol. 35, pp. 1354–1357, 2016. (DOI: 10.1021/acs.organomet.6b00126)
 94. Ryo Murakami, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura, “Site-Selective and Stereoselective C(sp³)-H Borylation of Alkyl Side Chains of 1,3-Azoles with a Silica-Supported Monophosphine-Iridium Catalyst”, *Synlett*, vol. 27, pp. 1187–1192, 2016. (DOI: 10.1055/s-0035-1561599)
 95. Ganesan Elumalai, Hidenori Noguchi, Andrey Lyalin, Tetsuya Taketsugu, and Kohei Uosaki, “Gold Nanoparticle Decoration of Insulating Boron Nitride Nanosheet on Inert Gold Electrode Towards an Efficient Electrocatalyst for the Reduction of Oxygen to Water”, *Electrochemistry Communications*, vol. 66, pp. 53–57, 2016. (DOI: 10.1016/j.elecom.2016.02.021)
 96. Min Gao, Masashi Adachi, Andrey Lyalin, and Tetsuya Taketsugu, “Long Range Functionalization of h-BN Monolayer by Carbon Doping”, *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 120, pp. 15993–16001, 2016. (DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b12706)
 97. Takeshi Iwasa, Masato Takenaka, and Tetsuya Taketsugu, “Generalized theoretical method for the interaction between arbitrary nonuniform electric field and molecular vibrations: Toward near-field infrared spectroscopy and microscopy”, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 144, p. 12416, 2016. (DOI: 10.1063/1.4944937)
 98. Takuya Ishitsuka, Yasuhiro Okuda, Robert K Szilagy, Seiji Mori and Yasushi Nishihara, “The molecular mechanism of palladium-catalysed cyanoesterification of methyl cyanofomate onto norbornene”, *Dalton Transactions*, vol. 45, pp. 7786–7793, 2016. (DOI: 10.1039/C6DT00341A)
 99. Yu Harabuchi, Julien Eng, Etienne Gindensperger, Tetsuya Taketsugu, Satoshi Maeda, and Chantal Daniel, “Exploring the Mechanism of Ultrafast Intersystem Crossing in Re(I) Carbonyl Bipyridine Halide Complexes: Key Vibrational Modes and Spin-Vibronic Quantum Dynamics”, *Journal of Chemical Theory and Computations*, vol. 12, pp. 2335–2345, 2016 (DOI: 10.1021/acs.jctc.6b00080).
 100. Kotaro Shimada, Atsushi Kobayashi, Yuriko Ono, Hiroki Ohara, Tatsuya Hasegawa, Tetsuya Taketsugu,

- Eri Sakuda, Soichiro Akagi, Noboru Kitamura, and Masako Kato, “Core-Structure-Dependent Luminescence of Thiolato-Bridged Copper(I) Cluster Complexes”, *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 120, pp. 16002–16011, 2016 (DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b12688).
101. Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda, “Nonadiabatic Pathways of Furan and Dibenzofuran: What Makes Dibenzofuran Fluorescent?”, *Chemistry Letters*, vol. 45, pp. 940–942, 2016 (DOI: 10.1246/cl.160398)
102. Guixiang Zeng, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Shigeyoshi Sakaki, “Theoretical Study of Hydrogenation Catalysis of Phosphorus Compound and Prediction of Catalyst with High Activity and Wide Application Scope”, *ACS Catalysis*, vol. 6, pp. 4859–4870, 2016 (10.1021/acscatal.5b02968).
103. Ryo Iikubo, Taro Sekikawa, Yu Harabuchi, and Tetsuya Taketsugu, “Structural dynamics of photochemical reactions probed by time-resolved photoelectron spectroscopy using high harmonic pulse”, *Faraday Discussions*, vol. 194, pp. 147–160, 2016 (DOI: 10.1039/C6FD00063K).
104. Kenichiro Saita, Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, Osamu Ishitani, and Satoshi Maeda, “Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of *fac*-[ReI(bpy)(CO)₃(PR₃)⁺ complex”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 18, pp. 17557–17564, 2016 (DOI: 10.1039/C6CP02314B).
105. Yuto Yasuda, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Copper-Catalyzed Enantioselective Allyl–Allyl Coupling between Allylic Boronates and Phosphates with a Phenol/*N*-Heterocyclic Carbene Chiral Ligand”, *Angewante Chemie International Edition*, vol. 55, pp.10816–10820, 2016 (DOI: 10.1002/anie.201605125).
106. Masato Kobayashi and Tetsuya Taketsugu, “Divide-and-Conquer Hartree–Fock–Bogoliubov Method and Its Application to Conjugated Diradical Systems”, *Chemistry Letters*, vol. 45, pp. 1268–1270, 2016 (DOI: 10.1246/cl.160699).
107. Kohei Uosaki, Ganesan Elumalai, Hung Cuong Dinh, Andrey Lyalin, Tetsuya Taketsugu, and Hidenori Noguchi, “Highly Efficient Electrochemical Hydrogen Evolution Reaction at Insulating Boron Nitride Nanosheet on Inert Gold Substrate”, *Scientific Reports*, vol. 6, p. 32217, 2016 (DOI: 10.1038/srep32217).
108. Kaoru Yamazaki, Yasunori Miyazaki, Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, Satoshi Maeda, Yoshiya Inokuchi, Shin-nosuke Kinoshita, Masataka Sumida, Yuuki Onitsuka, Hiroshi Kohguchi, Masahiro Ehara, and Takayuki Ebata, “Multi-Step Intersystem Crossing Pathways in Cinnamate-Based UV-B Sunscreens”, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 7, pp. 4001–4007, 2016 (DOI: 10.1021/acs.jpcllett.6b01643).
109. Guixiang Zeng, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Shigeyoshi Sakaki, “Catalytic Hydrogenation of Carbon Dioxide with Ammonia-Borane by Pincer-type Phosphorus Compound: A Theoretical Prediction”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 138, pp. 13481–13484, 2016 (DOI: 10.1021/jacs.6b07274).
110. Takako Kudo, Tetsuya Taketsugu, and Mark S. Gordon, “Ab initio Molecular Dynamics Study of H₂ Formation Inside POSS Compounds. 2. The Effect of an Encapsulated Hydrogen Molecule”, *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 120, pp. 8699–8715, 2016 (DOI: 10.1021/acs.jpca.6b07907).
111. Yu Harabuchi, Rina Yamamoto, Satoshi Maeda, Satoshi Takeuchi, Tahei Tahara, and Tetsuya Taketsugu, “Ab Initio Molecular Dynamics Study of the Photoreaction of 1,1'-Dimethylstilbene Upon S₀ → S₁ Excitation”, *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 120, pp. 8804–8812, 2016 (DOI: 10.1021/acs.jpca.6b07548).
112. Yosuke Sumiya, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda, “Full Rate Constant Matrix Contraction Method for Obtaining Branching Ratio of Unimolecular Decomposition”, *Journal of Computational Chemistry*, vol. 38, pp. 101–109, 2017 (DOI: 10.1002/jcc.24526).
113. Majharul Haque Khan, Sina S. Jamali, Andrey Lyalin, Paul J. Molino, Lei Jiang, Hua Kun Liu, Tetsuya Taketsugu, and Zhenguo Huang, “Atomically thin hexagonal boron nitride nanofilm for Cu protection: The importance of film perfection”, *Advanced Materials*, vol. 29, p. 1603937, 2017 (DOI: 10.1002/adma.201603937).
114. Tomohiro Iwai, Ryotaro Tanaka, and Masaya Sawamura, “Synthesis, Coordination Properties, and Catalytic Application of Triarylmethane-Monophosphines”, *Organometallics*, vol. 35, pp 3959–3969, 2017 (DOI: 10.1021/acs.organomet.6b00752).
115. Tomohiro Iwai, Tomoya Harada, Hajime Shimada, Kiichi Asano, and Masaya Sawamura, “A Polystyrene-Cross-Linking Bisphosphine: Controlled Metal Monochelation and Ligand-Enabled First-Row Transition Metal Catalysis”, *ACS Catalysis*, vol. 7, pp 1681–1692, 2017 (DOI: 10.1021/acscatal.6b02988).
116. Kentaro Hojoh, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Synthesis of α -Quaternary Formimides and Aldehydes through Umpolung Asymmetric Copper Catalysis with Isocyanides”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 139, pp 2184–2187, 2017 (DOI: 10.1021/jacs.6b12881).
117. Min Gao, Daisuke Horita, Yuriko Ono, Andrey Lyalin, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu, “Isomerization in Gold Clusters upon O₂ Adsorption”, *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 121, pp.

- 2661–2668, 2017 (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b09919).
118. Andrey Lyalin, Ken-Ichi Shimizu, and Tetsuya Taketsugu, “Interface Effects in Hydrogen Elimination Reaction from Isopropanol by Ni₁₃ Cluster on θ -Al₂O₃(010) Surface”, *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 121, pp. 3488–3495, 2017 (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b00839).
119. Ken Sakaushi, Andrey Lyalin, Satoshi Tominaka, Tetsuya Taketsugu, and Kohei Uosaki, “Two-Dimensional Corrugated Porous Carbon-, Nitrogen-Framework/Metal Heterojunction for Efficient Multi-Electron Transfer Processes with Controlled Kinetics”, *ACS Nano*, vol. 11, pp. 1770–1779, 2017 (DOI: 10.1021/acsnano.6b07711).
120. Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda, “Combined Gradient Projection / Single Component Artificial Force Induced Reaction (GP/SC-AFIR) Method for an Efficient Search of Minimum Energy Conical Intersection (MECI) Geometries”, *Chemical Physics Letters*, vol. 674, pp. 141–145, 2017 (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.02.069).
121. Takayoshi Yoshimura, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, Masaya Sawamura, Keiji Morokuma, and Seiji Mori, “Exploring Full Catalytic Cycle of Rhodium(I)-BINAP Catalyzed Isomerisation of Allylic Amines: A Graph Theoretical Approach for Path Optimisation”, *Chemical Science*, vol. 8, pp. 4475–4488 (DOI: 10.1039/C7SC00401J).
122. Yurie Takayama, Takaaki Ishii, Hirohisa Ohmiya, Tomohiro Iwai, Martin C. Schwarzer, Seiji Mori, Tohru Taniguchi, Kenji Monde, and Masaya Sawamura, “Asymmetric Synthesis of β -Lactams through Copper-Catalyzed Alkyne–Nitrene Coupling with Prolinol-Phosphine Chiral Ligand”, *Chemistry - A European Journal*, in press (DOI: 10.1002/chem.201702070).
123. Tomohiro Iwai, Kiichi Asano, Tomoya Harada, and Masaya Sawamura, “Polystyrene-Cross-Linking Ortho-Substituted Triphenylphosphines: Synthesis, Coordination Properties, and Application to Pd-Catalyzed Cross-Coupling of Aryl Chlorides”, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, in press (DOI: 10.1246/bcsj.20170141).
124. Eiji Yamamoto, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Hajime Ito, “Transition-Metal-Free Boryl Substitution using Silylboranes and Alkoxy Bases”, *Synlett*, in press (DOI: 10.1055/s-0036-1588772).
125. Ryohei Uematsu, Chihiro Saka, Yosuke Sumiya, Tomoya Ichino, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda, “Autocatalytic Cycle in Autoxidation of Triethylborane”, *Chemical Communications*, in press (10.1039/C7CC02541F).
126. Tomohiro Seki, Noriaki Tokodai, Shun Omagari, Takayuki Nakanishi, Yasuchika Hasegawa, Takeshi Iwasa, Tetsuya Taketsugu, and Hajime Ito, “A Luminescent Mechanochromic 9-Anthryl Gold(I) Isocyanide Complex with an Emission Maximum at 900 nm after Mechanical Stimulation”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 139, pp. 6514–6517, 2017 (DOI: 10.1021/jacs.7b00587).
127. Makito Takagi, Tetsuya Taketsugu, Hiori Kino, Yoshitaka Tateyama, Kiyoyuki Terakura, and Satoshi Maeda, “Global search for low-lying crystal structures using the artificial force induced reaction method: A case study on carbon”, *Physical Review B*, vol. 95, p. 184110, 2017 (DOI: 10.1103/PhysRevB.95.184110).
128. Andrey Lyalin, Kohei Uosaki, and Tetsuya Taketsugu, “Oxygen Reduction Reaction Catalyzed by Small Gold Cluster on h-BN/Au(111) Support”, *Electrocatalysis* (2017). <https://doi.org/10.1007/s12678-017-0395-5> (DOI: 10.1007/s12678-017-0395-5).
129. Martin C Schwarzer, Ryosuke Konno, Takayuki Hojo, Akimichi Ohtsuki, Keisuke Nakamura, Ayaka Yasutome, Hiroaki Takahashi, Toshiaki Shimasaki, Mamoru Tobisu, Naoto Chatani, Seiji Mori, “Combined Theoretical and Experimental Studies of Nickel-Catalyzed Cross-Coupling of Methoxyarenes with Arylboronic Esters via C–O Bond Cleavage”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 139, pp. 10347–10358, 2017 (DOI: 10.1021/jacs.7b04279).
130. Xue-fang Yu, Shohei Yamazaki, and Tetsuya Taketsugu, “Solvent Effect on the Excited-State Double Proton Transfer Mechanism in 7-Azaindole Dimer: A TDDFT Study with Polarizable Continuum Model”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 19, pp. 23289–23301, 2017 (DOI: 10.1039/C7CP04942K).
131. Xiaowei Song, Matias R. Fagiani, Sreekanta Debnath, Min Gao, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, Sandy Gewinner, Wieland Schöllkopf, Knut R. Asmis, and Andrey Lyalin, “Excess Charge Driven Dissociative Hydrogen Adsorption on Ti₂O₄”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 19, pp. 23154–23161, 2017 (DOI: 10.1039/C7CP03798H).
132. Kei Yanagisawa, Yuichi Kitagawa, Takayuki Nakanishi, Tomohiro Seki, Tomoko Akama, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu, Hajime Ito, Koji Fushimi, and Yasuchika Hasegawa, “Enhanced Luminescence of Asymmetrical Seven-coordinate Eu(III) Complexes Including LMCT Perturbation”, *European Journal of Inorganic Chemistry*, vol. 2017, pp. 3843–3848, 2017 (DOI: 10.1002/ejic.201700815).
133. Ronald L. Reyes, Tomoya Harada, Tohru Taniguchi, Kenji Monde, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura, “Enantioselective Rh- or Ir-Catalyzed Directed C(sp³)-H Borylation with Phosphoramidite Chiral Ligands”, *Chemistry Letters*, vol. 46, pp. 1747–1750, 2017 (DOI: 10.1246/cl.170853).

(本論文は2022年7月5日付で取り下げられたため、成果から除外いたします)

134. Yoshiaki Nishijima, Shogo Shimizu, Keisuke Kurihara, Yoshikazu Hashimoto, Hajime Takahashi, Armandas Balcytis, Gediminas Seniutinas, Shinji Okazaki, Jurga Juodkazyte, Takeshi Iwasa, Tetsuya Taketsugu, Yoriko Tominaga, and Saulius Juodkazis, “Optical readout of hydrogen storage in films of Au and Pd”, *Optics Express*, vol. 25, pp. 24081-24092, 2017 (DOI: 10.1364/OE.25.024081).
135. Hiromi Oshita, Misa Kikuchi, Kaoru Mieda, Takashi Ogura, Takayoshi Yoshimura, Fumito Tani, Tatsuo Yajima, Hitoshi Abe, Seiji Mori, and Yuichi Shimazaki, “Characterization of Group 10 Metal-p-substituted Phenoxy Radical Complexes with Schiff Base Ligands”, *ChemistrySelect*, vol. 2, pp. 10221-10231, 2017 (DOI: 10.1002/slct.201701986).
136. Yuriko Ono, Kiyoshi Yagi, Toshiyuki Takayanagi, and Tetsuya Taketsugu, “Fundamental peak disappears upon binding of noble gas: a case of vibrational spectrum of PtCO in argon matrix”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 20, pp. 3296-3302, 2018 (DOI: 10.1039/C7CP06713E).
137. Satoshi Maeda, Yu Harabuchi, Makito Takagi, Kenichiro Saita, Kimichi Suzuki, Tomoya Ichino, Yosuke Sumiya, Kanami Sugiyama, and Yuriko Ono, “Implementation and Performance of the Artificial Force Induced Reaction Method in the GRRM17 Program” *Journal of Computational Chemistry*, vol. 39, pp. 233–251, 2018 (DOI: 10.1002/jcc.25106).
138. Ayako Furuhashi, Takashi Imamura, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu, “Theoretical study of initial reactions of amine (CH₃)_nNH_(3-n) (n = 1, 2, 3) with ozone”, *Chemical Physics Letters*, vol. 692, pp. 111-116, 2018 (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.12.008).
139. Takuro Tsutsumi, Yu Harabuchi, Yuriko Ono, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu, “Analyses of trajectory on-the-fly based on the global reaction route map”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 20, pp. 1364-1372, 2018 (DOI: 10.1039/C7CP06528K).
140. Hiromi Oshita, Takayoshi Yoshimura, Seiji Mori, Fumito Tani, Yuichi Shimazaki, Osamu Yamauchi, “Characterization of the one-electron oxidized Cu(II)-salen complexes with a side chain aromatic ring: The effect of the indole ring on the Cu(II)-phenoxy radical species”, *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 2018, Vol. 23, pp. 51-59 (DOI: 10.1007/s00775-017-1508-6).
141. Kenta Kokado, Takashi Machida, Takeshi Iwasa, Tetsuya Taketsugu, and Kazuki Sada, “Twist of C=C Bond Plays a Crucial Role for Quenching of AIE-Active Tetraphenylethene Derivatives in Solution”, *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 122, pp. 245-251, 2018 (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b11248).
142. Tomohiro Iwai, Masahiro Ueno, Hiori Okochi, and Masaya Sawamura, “Synthesis of Cyclobutene-Fused Eight-Membered Carbocycles through Gold-Catalyzed Intramolecular Enyne [2+2] Cycloaddition”, *Advanced Synthesis & Catalysis*, vol. 360, pp. 670–675, 2018 (DOI: 10.1002/adsc.201701193).
143. Tomoya Harada, Yusuke Ueda, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura, “Nickel-Catalyzed Amination of Aryl Fluorides with Primary Amines”, *Chemical Communications*, vol. 54, pp. 1718–1721, 2018 (DOI: 10.1039/C7CC08181B).
144. Yu Harabuchi, Kenichiro Saita, and Satoshi Maeda, “Exploring radiative and nonradiative decay paths in indole, isoindole, quinoline, and isoquinoline”, *Photochemical & Photobiological Sciences*, in press (DOI: 10.1039/C7PP00385D).
145. Satoshi Maeda, Kanami Sugiyama, Yosuke Sumiya, Makito Takagi, and Kenichiro Saita, “Global Reaction Route Mapping for Surface Adsorbed Molecules: A Case Study for H₂O on Cu(111) Surface”, *Chemistry Letters*, vol. 47, pp. 396–399, 2018 (DOI: 10.1246/cl.171194).
146. Yusuke Kondo, Masato Kobayashi, Tomoko Akama, Takeshi Noro, and Tetsuya Taketsugu, “All-electron relativistic computations on the low-lying electronic states, bond length, and vibrational frequency of CeF diatomic molecule with spin-orbit coupling effects”, *Journal of Computational Chemistry*, in press (DOI: 10.1002/jcc.25171).
147. Masanori Ebina, Takeshi Iwasa, Yu Harabuchi, and Tetsuya Taketsugu, “Time-Dependent Density Functional Theory Study on Higher Low-Lying Excited States of Au₂₅(SR)₁₈”, *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 122, pp. 4097–4104, 2018 (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12723).
148. Masato Kobayashi, Toshikazu Fujimori, and Tetsuya Taketsugu, “Automated error control in divide-and-conquer self-consistent field calculations”, *Journal of Computational Chemistry*, in press (DOI: 10.1002/jcc.25174).
149. Ayaka Yamazaki, Kazunori Nagao, Tomohiro Iwai, Hirohisa Ohmiya, Masaya Sawamura, “Phosphine-Catalyzed anti-Carboboration of Alkynoates with 9-BBN-Based 1,1-Diborylalkanes: Synthesis and Use of Multisubstituted γ -Borylallylboranes”, *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 57, pp. 3196–3199, 2018 (DOI: 10.1002/anie.201712351).
150. Martin C. Schwarzer, Akane Fujioka, Takaoki Ishii, Hirohisa Ohmiya, Seiji Mori, and Masaya Sawamura, “Enantiocontrol by Assembled Attractive Interactions in Copper-catalyzed Asymmetric Direct

- Alkynylation of α -Ketoesters with Terminal Alkynes: OH...O/sp³-CH...O Two-point Hydrogen-bonding Combined with Dispersive Attractions”, *Chemical Science*, in press (DOI: 10.1039/C8SC00527C).
151. Yuto, Yasuda, Hirohisa, Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Copper-Catalyzed Enantioselective Coupling between Allylboronates and Phosphates with a Phenol-Carbene Chiral Ligand: Asymmetric Synthesis of Chiral Branched 1,5-Dienes”, *Synthesis* in press.
152. Kentaro, Hojoh, Yoshinori Shido, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Copper-Catalyzed Enantioselective Intramolecular Alkylboron Allylic Alkylation”, *Chemistry Letters* in press (DOI: 10.1246/cl.180147).
153. Kazunori Nagao, Ayaka Yamazaki, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, “Phosphine-Catalyzed Anti-Hydroboration of Internal Alkynes”, *Organic Letters*, (DOI: 10.1021/acs.orglett.8b00390).

(2) その他の著作物 (総説、書籍など)

<和文>

1. 前田理, “ローミング経路”, 原子衝突学会誌 (しょうとつ), vol. 9, pp. 17, 2012.
2. 川守田創一郎, 澤村正也, “不活性 sp³-C-H 結合の化学変換—触媒設計によるチャレンジ””, 化学, vol. 68, pp. 72-73, 2013.
3. 前田理, “量子化学計算による反応設計を目指して—反応経路自動探索「GRRM」”, 化学, vol. 68, pp. 12-17, 2013.
4. 前田理, “化学反応経路を自動探索する”, ファルマシア, vol. 49, pp. 106-110, 2013.
5. 澤村正也, “シリカ固定化かご型ホスフィン Silica-SMAP および Silica-TRIP に基づく有機合成触媒反応の開発”, 和光純薬時報, vol. 82, pp 2-6, 2014.
6. 岩井智弘, “超分子のアプローチによるキラル遷移金属錯体触媒の精密制御”, 有機合成化学協会誌, vol. 72, pp. 68-69, 2014.
7. 前田理, 畑中美穂, 植松遼平, 武次徹也, 諸熊奎治, “人工力誘起反応法による化学反応経路の自動探索: 有機合成化学への応用と展望”, 有機合成化学協会誌, vol. 72, pp. 567-579, 2014.
8. 武次徹也, 橋本智裕, 中尾嘉秀, 八木清, 前田理, 小林正人, 小野ゆり子 (武次徹也編集, 平尾公彦監修), “新版すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル”, KS 化学専門書
9. 大宮寛久, 有機金属ハイライト「1,2-メタレート転位の新展開」, *Organometallic News*, p. 34, 2016.
10. 大宮寛久・澤村正也, 銅触媒の機能化に基づく高選択的合成反応の開発, 月刊「化学工業」(特集「戦略的触媒開発と応用」), vol. 67, pp 361-366, 2016.
11. 澤村正也, ナノと有機合成, 有機合成化学協会誌 (巻頭言), vol. 74, p. 581, 2016.
12. 岩井智弘, ベースメタルの可能性を引き出す, 化学, vol. 71, pp. 59-60, 2016.
13. 武次徹也・原渕祐・小野ゆり子・前田理, 分子の分かれ道 — 反応経路が分岐したとき分子はどちらの道を選ぶのか?, 化学, vol. 71, pp. 70-71, 2016.
14. 岩井智弘, 反応場設計に基づく触媒的芳香族 CH ホウ素化反応の位置制御, 触媒, vol. 59, p. 102, 2017.

<欧文>

1. Takao Tsuneda, and Tetsuya Taketsugu, “ π -Stacking on Density Functional Theory: A review”, π -Stacked Polymers and Molecules: Synthesis, properties and theory, T. Nakano, Ed. Springer, pp. 245-270, 2014.
2. Masaya Sawamura, and Hajime Ito, “Carbon-Boron and Carbon-Silicon Bond Formation”, Copper-Catalyzed Asymmetric Synthesis, Wiley-VCH: Weinheim. Chapter 6, pp. 157-177, 2014.
3. Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura, “Transition Metal Catalysis with Hollow-shaped Triethynylphosphine Ligands”, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, vol. 87, pp. 1315-1334, 2014. (DOI: 10.1246/bcsj.20140186)
4. Kenji Hara, Masaya Sawamura, and Atsushi Fukuoka, “High-Density Monolayers of Metal Complexes: Preparation and Catalysis”, *The Chemical Record*, vol. 14, pp. 869-878, 2014. (DOI: 10.1002/tcr.201402031)
5. Satoshi Maeda, Yu Harabuchi, Yuriko Ono, Tetsuya Taketsugu, and Keiji Morokuma, “Intrinsic reaction coordinate: Calculation, bifurcation, and automated search”, *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 115, pp. 258-269, 2015. (DOI: 10.1002/qua.24757)
6. Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, Keiji Morokuma, and Koichi Ohno, “Anharmonic Downward Distortion Following for Automated Exploration of Quantum Chemical Potential Energy Surfaces”,

- Bulletin of the Chemical Society of Japan, vol. 87, pp. 1315-1334, 2014. (DOI: 10.1246/bcsj.20140189)
7. Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura, "Copper-Catalyzed Allylic Substitution and Conjugate Addition with Alkylboranes", The Journal of the Society of Organic Synthetic Chemistry, Japan, vol. 72 (Special Issue in English), pp. 1207-1217, 2014.
 8. Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, Koichi Ohno, and Keiji Morokuma, "From Roaming Atoms to Hopping Surfaces: Mapping out Global Reaction Routes in Photochemistry", Journal of the American Chemical Society, vol. 137, pp. 3433-3445, 2015. (DOI: 10.1021/ja512394y)
 9. Tomohiro Iwai and Masaya Sawamura, "Transition-Metal-Catalyzed Site-Selective C-H Functionalization of Quinolines beyond C2 Selectivity", ACS Catalysis, vol. 5, pp. 5031-5040, 2015. (DOI: 10.1021/acscatal.5b01143)
 10. W. M. C. Sameera, Satoshi Maeda, and Keiji Morokuma, "Computational Catalysis Using the Artificial Force Induced Reaction Method", Accounts of Chemical Research, vol. 49, pp. 763-773, 2016. (DOI: 10.1021/acs.accounts.6b00023)
 11. T. Suzuki, H. Tamaoki, J. Nishida, H. Higuchi, T. Iwai, Y. Ishigaki, K. Hanada, R. Katoono, H. Kawai, K. Fujiwara, and T. Fukushima, "Redox-Mediated Reversible σ -Bond Formation/Cleavage in Organic Redox Systems: Synthesis, Properties, and Applications", Ed. T. Nishinaga, Wiley, Chapter 2, pp. 13-37, 2016. (DOI: 10.1002/9781118858981.ch2)
 12. Satoshi Maeda, Yu Harabuchi, Makito Takagi, Tetsuya Taketsugu, and Keiji Morokuma, "Artificial Force Induced Reaction (AFIR) Method for Exploring Quantum Chemical Potential Energy Surfaces", The Chemical Record, vol. 16, pp. 2232-2248, 2016 (DOI: 10.1002/tcr.201600043).
 13. Andrey Lyalin, Min Gao, and Tetsuya Taketsugu, "When inert becomes active: fascinating route for catalyst design", The Chemical Record, vol. 16, pp. 2324-2337, 2016 (DOI: 10.1002/tcr.201600035).
 14. W. M. C. Sameera, Akhilesh K. Sharma, Satoshi Maeda, Keiji Morokuma, "Artificial Force Induced Reaction Method for Systematic Determination of Complex Reaction Mechanisms", The Chemical Record, vol. 16, pp. 2349-2363, 2016 (DOI: 10.1002/tcr.201600052).

(3) 国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 90 件、国際会議 133 件)

<国内会議>

1. 中山哲 (北大院理)、"第一原理シミュレーションによる溶液内光化学反応と自由エネルギー解析"、第 13 回大つくば物理化学セミナー、鋸南町、千葉県、2012 年 12 月 7-8 日
2. 武次徹也 (北大院理)、"反応量子化学の展開: 反応経路概念と AIMD 法の拡張"、慶応理論化学セミナー、横浜市、2012 年 12 月 27 日
3. 前田理 (北大院理)、"化学反応経路の自動探索: コンピュータによる未知反応予測と超並列化の可能性"、第 9 回 創成シンポジウム、札幌市、2013 年 3 月 4 日
4. 森聖治、吉村誠慶、北條貴之、渡部良、野内哲 (茨城大理)、"Computational Studies of Mechanistic Insight into Prostaglandin Syntheses"、2012 年度 日本生物物理学会北海道支部例会、札幌市、2013 年 3 月 5 日
5. 森聖治 (茨城大理)、"理論化学の立場から生命化学と有機合成化学を見ると"、日本化学会第 93 春季年会、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、2013 年 3 月 22-25 日
6. 前田理 (北大院理)、"反応経路自動探索法の開発と未知反応機構の解明"、日本化学会第 93 春季年会 (進歩賞受賞講演)、立命館大学びわこ・くさつキャンパス、2013 年 3 月 22-25 日
7. 中山哲 (北大院理)、"溶液内光化学反応と自由エネルギー解析: 第一原理シミュレーション"、研究会「化学反応のポテンシャル曲面とダイナミクス」、京都大学理学研究科セミナーハウス、2013 年 3 月 30 日
8. 大宮寛久 (北大院理)、"高選択的アリル系カップリング反応の開発と展開"、第 7 回日本化学会東海支部若手研究者フォーラム「分子科学のライジングスター」、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2013 年 7 月 17 日
9. 大宮寛久 (北大院理)、"アリル型化合物のクロスカップリング反応"、第 10 回北大若手研究者の会、北海道大学学術交流会館、札幌市、2013 年 8 月 2 日
10. 前田理 (北大院理)、"化学反応経路自動探索法の開発, 応用, および, 巨大系への応用"、第 18 回高分子計算機科学研究会講座、東京工業大学蔵前会館ロイヤルブルーホール、東京都目黒区、2013 年 8 月 7 日

11. 澤村正也 (北大院理)、“有機合成における sp^3 -C-H 結合への 2 つの新しい視点”、第 30 回有機合成化学セミナー、せとうち児島ホテル、倉敷市、2013 年 9 月 17-19 日
12. 前田理 (北大院理)、“AFIR 法を用いた遷移状態サンプリングによる立体選択性解析”、シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2013」、京都大学福井謙一記念研究センター、京都市、2013 年 9 月 27 日
13. 武次徹也 (北大院理)、“星間分子の解離性再結合反応ダイナミクスに関する理論的研究”、Symposium on Cross-Talk between Chemistry and Planetary Sciences、北海道大学、札幌市、2013 年 10 月 9 日
14. 大宮寛久 (北大院理)、“銅触媒による高選択的炭素骨格構築法の開発”、第 2 回卓越拠点有機若手ワークショップ、京都大学理学研究科セミナーハウス、京都市、2013 年 11 月 18-19 日
15. 澤村正也 (北大院理)、“固定化ホスフィンに基づく高活性有機合成触媒の開発”、東ソー有機化学講演会、東ソー有機化学株式会社、周南市、2013 年 12 月 13 日
16. 大宮寛久 (北大院理)、“銅触媒による高選択的炭素骨格構築法の開発”、岡山大学次世代研究者・異分野研究連携育成支援事業シンポジウム「遷移金属触媒が先導する新しい分子変換」、岡山大学理学部、岡山市、2013 年 12 月 19 日
17. 武次徹也、Andrey Lyalin、高敏、堀田大資、小野ゆり子、前田理 (北大院理)、“金ナノクラスター触媒への理論的アプローチ”、触媒・電池元素戦略研究拠点 第 4 回公開シンポジウム、東京大学本郷キャンパス、東京都文京区、2014 年 3 月 19 日
18. 前田理 (北大院理)、“レア・イベントの自動探索に向けた反応経路自動探索法の開発と有機化学へ”、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、平塚市、2014 年 3 月 27-30 日
19. 大宮寛久 (北大院理)、“銅触媒による高選択的合成反応の開発”、日本化学会第 94 春季年会 (進歩賞受賞講演)、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014 年 3 月 27-30 日
20. 澤村正也 (北大院理)、“有機合成化触媒の分子技術”、JST さきがけ第 4 回「分子技術と新機能創出」領域会議 (アドバイザー特別講演)、旅館「鈴岡」、愛知県蒲郡市、2014 年 5 月 17-18 日
21. 大宮寛久 (北大院理)、“銅触媒の機能化による高選択的有機合成反応”、第 47 回有機金属若手の会 夏の学校、休暇村 大久野島、広島県竹原市、2014 年 9 月 1-3 日
22. 大宮寛久 (北大院理)、“銅触媒の機能化による高選択的有機合成反応の開発”、平成 26 年度第 1 回有機金属若手研究者の会、九州大学 病院キャンパス、福岡県福岡市、2014 年 9 月 22 日
23. 澤村正也 (北大院理)、“ケイ素官能基化第 3 級ホスフィンのシリカ担持と遷移金属触媒反応への応用”、第 18 回ケイ素化学協会シンポジウム、リゾートホテル ラフォーレ那須、栃木県那須郡那須町、2014 年 10 月 17-18 日
24. 澤村正也 (北大院理)、“高活性固相担持遷移金属錯体触媒の設計”、日本触媒講演会、株式会社日本触媒吹田研究所、大阪府吹田市、2014 年 10 月 28 日
25. 武次徹也 (北大院理)、“計算化学による有機反応の解析入門”、化学技術基礎講座『製品開発に必要な有機合成化学の基礎』、日本化学会 化学会館、東京都千代田区、2014 年 10 月 9-10 日
26. 大宮寛久 (北大院理)、“銅触媒の機能化に基づく高選択的有機合成反応の開発”、2014 年度 創薬科学フロンティアシンポジウム、京都薬科大学、京都府京都市、2014 年 11 月 22-23 日
27. 前田理 (北大院理)、“反応経路自動探索法の開発と応用”、先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会 次世代 CCWG 「次世代計算化学技術セミナー」、新化学技術推進協会 会議室、東京都千代田区、2014 年 11 月 14 日
28. 武次徹也 (北大院理)、“理論が提案し実験が実現する新しい酸素還元触媒の開発”、第二回元素戦略に基づいた触媒設計シンポジウム、首都大学東京 秋葉原サテライトキャンパス、東京都千代田区、2014 年 11 月 28 日
29. 前田理 (北大院理)、“GRRM 最新版で拓く化学反応研究の最前線”、「GRRM で拓く化学のニューフロンティア」～未知の化学を切り拓く～、学士会館、東京都千代田区、2014 年 11 月 30 日

30. 武次徹也 (北大院理)、“反応経路分岐現象への新しいアプローチ”、「GRRM で拓く化学のニューフロンティア」～未知の化学を切り拓く～、学士会館、東京都千代田区、2014 年 11 月 30 日
31. 武次徹也 (北大院理)、“元素戦略に基づく触媒開発:理論計算と実験のインタープレイ”、ESICB 電子論グループ分科会、分子科学研究所、愛知県岡崎市、2014 年 12 月 26-27 日
32. 前田理 (北大院理)、“反応経路自動探索法の開発と応用:分子の生成分解過程の解析と予測”、シミュレーションによる自然科学における階層と全体、桑山ビル 8 階、愛知県名古屋市、2015 年 1 月 19 日
33. 武次徹也 (北大院理)、“元素戦略に基づく触媒設計における理論計算の役割”、TCCI 第 4 回産学連携シンポジウム、東京大学弥生講堂 一条ホール、東京都文京区、2015 年 1 月 16 日
34. Tetauya Taketsugu (北大院理)、“Interplay of theory and experiment to develop novel electrocatalyst”, The 10th GREEN Symposium, 物質・材料研究機構, 茨城県つくば市, 2015 年 6 月 25 日
35. 大宮寛久 (北大院理)、“有機分子触媒による多置換アルケニルホウ素化合物の新合成法”, 日本薬学会北陸支部特別講演会, 金沢大学, 石川県金沢市, 2015 年 7 月 6 日
36. 前田理 (北大院理)、“化学反応経路の自動探索:コンピュータによる反応設計へ向けて”, 平成 27 年度スーパーサイエンスハイスクール生徒研究発表会研究者ミニライブ講演, インテックス大阪, 大阪府大阪市住之江区, 2015 年 8 月 6 日
37. 武次徹也 (北大院理)、“光励起反応のポテンシャル曲面とダイナミクス”, スーパーコンピュータワークショップ FY2015 “複雑な研究対象へ挑戦する計算分子科学”, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター, 愛知県岡崎市, 2015 年 9 月 7-8 日
38. 前田理 (北大院理)、“人工力誘起反応法を用いる有機反応・光反応の機構解析:手法開発から応用まで”, 化学反応経路探索のニューフロンティア 2015, 品川区立総合区民会館, 東京都品川区, 2015 年 9 月 15 日
39. 前田理 (北大院理)、“反応経路自動探索法による反応機構解析”, 2015 年有機反応機構研究会, 高知県立県民文化ホール, 高知県高知市, 2015 年 9 月 27-28 日
40. 大宮寛久 (北大院理)、“有機分子触媒による官能基密集型アルケンの合成法開発”, 新学術領域「有機分子触媒による未来型分子変換」第 4 回有機分子触媒 若手セミナー, 名古屋金山研修センター・ゼミナールプラザ, 愛知県名古屋市, 2015 年 10 月 3-4 日
41. 武次徹也 (北大院理)、“量子化学における反応経路モデルと経路分岐”, 統計数理研究所 数学協働プログラムワークショップ「大自由度分子系における化学反応機序の理解と制御」, 北海道大学, 北海道札幌市, 2015 年 10 月 31 日-11 月 1 日
42. 澤村正也 (北大院理)、“新規固相担持法に基づく高活性金属錯体触媒の開発”, 第 108 回有機合成シンポジウム, 早稲田大学, 東京都新宿区, 2015 年 11 月 5-6 日
43. 長尾一哲 (北大院総合化)、“ホスフィン有機分子触媒による多置換アルケニルホウ素化合物の新合成法の開発”, 若手研究者のための有機合成化学札幌セミナー, 北海道大学, 北海道札幌市, 2015 年 11 月 24 日
44. 澤村正也 (北大院理)、“新規固相担持法に基づく高活性金属錯体触媒の開発”, 日産化学工業株式会社 学術講演会, 日産化学工業株式会社 物質科学研究所, 千葉県船橋市, 2015 年 11 月 26 日
45. 澤村正也 (北大院理)、“固相担持法による高活性遷移金属錯体の創製”, 文部科学省新学術領域研究 (平成 27 年~31 年)「高難度物質変換反応の開発を指向した精密制御反応場の創出」第一回公開シンポジウム, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2016 年 1 月 30 日
46. 武次徹也 (北大院理)、“反応量子化学の基礎:反応経路とダイナミクス”, 平成 27 年度計算物質科学セミナー, 東北大学, 宮城県仙台市, 2016 年 3 月 4 日
47. 前田理 (北大院理)、“化学反応経路探索 GRRM とその応用”, 第 29 期 CAMM フォーラム本例会, アイビーホール, 東京都渋谷区, 2016 年 3 月 4 日
48. 武次徹也 (北大院理)、“触媒反応への理論化学からのアプローチ:実験との協働と概念の提案”, 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, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター, 愛知県岡崎市, 2016 年 3 月 9-10 日
49. 小林正人 (北大院理)、“大規模系の量子化学計算と高次元データ抽出”, 分子技術イニシアティブセミナー「分子技術と理論計算・データ科学」, 大阪大学, 大阪府豊中市, 2016 年

3月14-15日

50. 武次徹也 (北大院理), “反応経路分岐に関する理論研究: 最近の展開”, 量子化学の最近の進展 -大規模・複雑系の量子化学シミュレーション, 理化学研究所 計算科学研究機構, 兵庫県神戸市, 2016年3月23日
51. 大宮寛久 (北大院理), “有機分子触媒による官能基集積型アルケンの新合成法”, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学, 京都府京田辺市, 2016年3月24-27日
52. 前田理 (北大院理), “反応経路自動探索法を基盤とする化学反応の理論設計技術”, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学, 京都府京田辺市, 2016年3月24-27日
53. 前田理 (北大院理), “有機反応の系統的理解と設計へ向けた反応経路自動探索法の開発”, 第28回万有札幌シンポジウム, 北海道大学, 北海道札幌市, 2016年7月1日
54. 小林正人 (北大院理), “量子化学計算とインフォマティクス: 触媒開発への応用を目指して”, 触媒開発への応用を目指したインフォマティクス研究会, 九州大学, 福岡県福岡市, 2016年7月12日
55. 武次徹也 (北大院理), “反応経路分岐の理論化学”, 2016年有機反応機構研究会, 長崎県工業技術センター, 長崎県大村市, 2016年9月5-7日
56. 前田理 (北大院理), “反応経路自動探索法の開発と触媒への展開”, 第118回触媒討論会, 岩手大学, 岩手県盛岡市, 2016年9月21-23日
57. 澤村正也 (北大院理), “化学のパイオニアを目指して: 反応と触媒の設計、合成、発見、イノベーション”, 北海道大学理学部化学同窓会「るつぼ」セミナー, 北海道大学, 北海道札幌市, 2016年9月23日
58. 岩井智弘 (北大院理), “固相多点担持ホスフィンによる次世代型不均一系遷移金属触媒の開発”, 分子研若手研究会「若い世代が創る次世代型分子触媒の開発とその展望」, 分子科学研究所, 愛知県岡崎市, 2016年11月10-11日
59. 大宮寛久 (北大院理), “フェノール-NHC 複合型キラル配位子を用いた銅触媒不斉炭素-炭素結合形成反応の開発”, 日本プロセス化学会 2016 ウィンターシンポジウム, タワーホール船堀, 東京都江戸川区, 2016年11月11日
60. 大宮寛久 (北大院理), “レアメタルフリー有機合成を指向した新触媒反応の開発”, 南方研若手研究者セミナー, 大阪大学, 大阪府吹田市, 2016年11月19日
61. 前田理 (北大院理), “人工力誘起反応法: 最近の応用例と今後の可能性”, IQCE 量子化学探索講演会 2016「量子化学で探る化学の最先端」, 東京大学, 東京都文京区, 2016年11月19日
62. 前田理 (北大院理), “反応経路自動探索プログラム GRRM の開発と触媒への展開”, ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回連携推進ワークショップ: 触媒元素戦略研究との連携を求めて, 北海道大学工学部フロンティア応用科学研究棟1階セミナー室1(105席), 北海道札幌市, 2016年11月29-30日
63. 前田理 (北大院理), “Mechanism of the Photochemical Ligand Substitution of Tricarbonyl Re(I) Complex”, 第9回有機触媒シンポジウム, 名古屋大学, 愛知県名古屋市, 2016年12月1-2日
64. 武次徹也 (北大院理), “触媒開発に理論化学は役に立つか? 未知触媒と未知反応機構へのアプローチ”, 住友化学講演会, 住友化学千葉工場, 千葉県袖ヶ浦市, 2016年12月8日
65. 武次徹也 (北大院理), “理論計算が拓く非白金燃料電池触媒探索の試み”, ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第3回公開シンポジウム, 東京大学, 東京都文京区, 2016年12月15-16日
66. 前田理 (北大院理), “反応経路自動探索 GRRM プログラムの最近の展開”, 第7回 NTChem ワークショップ, 理化学研究所 東京連絡事務所, 東京都中央区, 2017年3月15日
67. 小林正人 (北大院理), “データ科学を利用した量子化学計算結果の解析と触媒への応用”, 1st AICS materials informatics school: 情報・データ科学との連携・融合による物性物理・量子化学の新展開, 理化学研究所計算科学研究機構, 兵庫県神戸市, 2017年3月22日
68. 澤村正也 (北大院理), “分子と固体でつくる高活性有機合成触媒”, 北大-NIMS ジョイントシンポジウム, 北海道大学フロンティア応用科学研究棟レクチャーホール, 北海

- 道札幌市, 2017年4月21日
69. 前田理 (北大院理), “反応経路自動探索法の開発とその高度汎用化へ向けて”, 北大-NIMS ジョイントシンポジウム, 北海道大学フロンティア応用科学研究棟レクチャーホール, 北海道札幌市, 2017年4月21日
 70. 澤村正也 (北大院理), “固定化ホスフィンによる触媒デザイン”, 第7回CSJ化学フェスタ, JST 特別企画: ACT-C プログラムが生み出す未来の化学技術, タワーホール船堀, 千葉県船橋市, 2017年10月17-19日
 71. 前田理 (北大院理), “人工力誘起反応法のGRRMプログラムへの実装とその応用”, IQCE 量子化学探索講演会2017「量子化学で探る化学の最先端」, 学士会館, 東京都千代田区, 2017年10月21日
 72. 岩井智弘 (北大院理), “固相多点担持法による高活性金属錯体触媒の設計開発”, 第1回産総研化学研究シンポジウム「夢見る30代化学者たちの挑戦」, 産業技術総合研究所, 茨城県つくば市, 2017年11月2日
 73. 前田理 (北大院理), “有機合成反応の系統的な機構解析と経路予測へ向けて: 反応経路自動探索プログラムGRRMを用いたアプローチ”, 平成29年度秋季有機合成化学講習会, 東京都渋谷区, 2017年11月15-16日
 74. 武次徹也 (北大院理), “解離性再結合反応の第一原理分子動力学シミュレーション”, 宇宙生命計算科学連携拠点第3回ワークショップ, 筑波大学, 茨城県つくば市, 2017年11月20-21日
 75. 前田理 (北大院理), “有機合成反応の反応経路ネットワークとその解析”, 第二回有機若手ワークショップ, 京都大学, 京都府左京区, 2017年11月29-30日
 76. 岩井智弘 (北大院理), “固相担体の特性を活かした高活性金属錯体触媒の創製”, 2017年度 触媒学会北海道支部 札幌講演会, 北海道大学, 札幌市, 2017年12月4日
 77. 小林正人 (北大院理), “反応経路探索とインフォマティクスを援用した触媒の理論研究”, ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第4回公開シンポジウム, 神戸大学・先端融合研究環統合研究拠点コンベンションホール, 兵庫県神戸市, 2017年12月11-12日
 78. 武次徹也 (北大院理), “隠れた反応経路 - 固有反応座標を超えて”, 化学科主催研究会「お茶の水女子大学の理論化学と計算化学」, お茶の水女子大学, 東京都文京区, 2017年12月23日
 79. 岩井智弘 (北大院理), “反応場の特性を活かした高活性金属錯体触媒の設計”, 平成29年度 日本化学会北海道支部奨励賞 受賞講演, 北海道大学, 札幌市, 2018年1月17日
 80. 武次徹也 (北大院理), “元素戦略にもとづく触媒開発研究 ~理論計算と実験実証のインタープレイ~”, スーパーコンピュータワークショップ2017「機能性材料設計への最新の計算科学アプローチ」, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター, 愛知県岡崎市, 2018年1月23-24日
 81. 前田理 (北大院理), “反応経路自動探索プログラム GRRM とその応用: 固体表面反応および結晶構造探索への展開を中心に”, 第17回GREENシンポジウム, 一橋大学, 東京都千代田区, 2018年1月25日
 82. 前田理 (北大院理), “人工力誘起反応法による反応経路の自動探索”, 第3回元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>/大型研究施設連携シンポジウム, 東京大学, 東京都文京区, 2018年2月5-6日
 83. 森聖治 (茨城大理), “酵素反応機構解析における量子化学の役割-シトクロムP450およびプロスタグランジン合成酵素を例に-”, 生物学・光源・物性研究者による量子生物学勉強会(第2回), 茨城大学 水戸キャンパス, 茨城県水戸市, 2018年2月8日
 84. 小林正人 (北大院理), “反応経路探索とインフォマティクスを援用した触媒の理論研究”, 第5回材料系ワークショップ~第一原理計算とインフォマティクス~, 秋葉原UDX, 東京都千代田区, 2018年2月13日
 85. 武次徹也 (北大院理), “量子化学研究の最新の展開: 振動状態理論・反応経路網・ダイナミクス”, 2017年度「物質階層原理研究」研究報告会, 理化学研究所 鈴木梅太郎ホール, 埼玉県和光市, 2018年2月13-14日
 86. 武次徹也 (北大院理), “理論計算による未知触媒開発と未知反応機構解明”, 計算材料

学センター セミナーシリーズ スパコンプロフェッショナル No. 11, 東北大学, 宮城県仙台市, 2018年2月23日

87. 前田理 (北大院理), “Finding reaction pathways and their networks by first principle calculation”, 第32回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMDR) ワークショップ, 大阪大学, 大阪府豊中市, 2018年2月26日-3月2日
88. 小林正人 (北大院理), “反応経路探索とインフォマティクス: 触媒・表面吸着系計算への応用”, ワークショップ「データ科学との融合による化学の新展開」, 奈良先端科学技術大学, 奈良県生駒市, 2018年3月13日
89. 清水洋平 (北大院理), “一価銅触媒の特性を活かした化学選択的反応の開発”, 日本化学会第98春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 千葉県船橋市, 2018年3月20日-3月23日
90. 前田理 (北大院理), “量子化学計算と反応経路自動探索による有機合成反応の理解と設計”, 日本化学会第98春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 千葉県船橋市, 2018年3月20日-3月23日

<国際会議>

1. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Ab initio molecular dynamics approach to photo-excited reactions and tunneling reactions”, 17th Malaysian Chemical Congress (17MCC), Kuala Lumpur, Malaysia, Oct. 15-17, 2012.
2. Akira Nakayama (Hokkaido University), “Excited-state QM/MM-MD simulations of small organic molecules in the solution phase”, 17th Malaysian Chemical Congress (17MCC), Kuala Lumpur, Malaysia, Oct. 15-17, 2012.
3. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study of excited-state dynamics and tunneling splitting of polyatomic molecules”, Cambodian Malaysian Chemical Conference (CMCC), Siem Reap, Cambodia, Oct. 19-21, 2012.
4. Akira Nakayama (Hokkaido University), “Computational study of relaxation pathways in electronically excited states of dye molecules in the gas and solution phases”, Cambodian Malaysian Chemical Conference (CMCC), Siem Reap, Cambodia, Oct. 19-21, 2012.
5. Ryo Murakami, Soichiro Kawamorita, Tomohiro Iwai, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Site Selective Borylation of Unactivated Internal C(sp³)-H Bonds Catalyzed by Rh or Ir Complexes with Silica-Supported Monophosphine Ligands”, The 7th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (ICCEOCA-7), Nanyang Technological University, Singapore, Dec. 11-14, 2012.
6. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Recent advances in computational chemistry: from excited state dynamics to gold nanocatalysts”, CMS seminar / NIMS 連携セミナー, Tsukuba, Jan. 30, 2013.
7. Seiji Mori (Ibaraki University), “Computational studies on mechanistic insight into prostaglandin syntheses”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2013, Chon Buri, Thailand, Jan. 23-25, 2013.
8. Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), “Development of Highly-controlled Allylic Bond Formation Reactions”, The 1st FCC International Symposium ~Next Generation of Molecular Chemistry~, Hokkaido University, Feb. 22, 2013.
9. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical Study on Photo-Isomerization Pathways of Azobenzene: AIMD Simulations and Excited-State Potential Energy Surfaces”, CRC International Symposium in Strasbourg: Chemical Theory for Complex Systems, Strasbourg, France, Mar. 7-8, 2013.
10. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Development and Applications of Automated Reaction Path Search Methods: The Global Reaction Route Mapping (GRRM) Strategy”, 10th Fukui Center Seminar, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Mar. 21, 2013.
11. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Site-selective C-H Borylation with Solid-supported Transition Metal Catalysts”, Asian Core Program Award Lecture at National Ching Hua University, Hsingchu, Taiwan, May 22, 2013.
12. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Site-selective C-H Borylation with Solid-supported Transition Metal Catalysts”, Asian Core Program Award Lecture at National Chung Hsing University, Taichung, Taiwan, May 23, 2013.
13. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Site-selective C-H Borylation with Solid-supported

- Transition Metal Catalysts”, Asian Core Program Award Lecture at National Taiwan Normal University, Taipei, Taiwan, May 24, 2013.
14. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Global Reaction Route Mapping Strategy for Systematic Prediction of Reaction Mechanisms in Homogeneous Catalysis”, Challenges in Computational Homogeneous Catalysis – 2013, Långholmen Conference Center, Stockholm, Sweden, Jun. 13-14, 2013.
 15. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Development of Automated Reaction Path Search Methods: Systematic Studies on the Mechanism of Chemical Reactions”, 15th Japan-Korea Symposium on Molecular Science, Hotel Kitano Plaza Rokko-so, Kobe, Japan, Jul. 3-5, 2013.
 16. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study on vibrational spectra and photo-isomerization pathways of Trans-Azobenzene in The $n\pi^*$ Excitation”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC-6), Gyeongju Hilton Hotel, Gyeongju, Korea, Jul. 10-13, 2013.
 17. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “The GRRM Strategy for Finding Chemical Reaction Pathways: Applications to Organic Reaction, Catalysis, and Enzyme Catalysis”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC-6), Gyeongju Hilton Hotel, Gyeongju, Korea, Jul. 10-13, 2013.
 18. Seiji Mori, Ryo Watanabe, Takaoki Ishii, Toshimitsu Moriya, Hirohisa Ohmiya and Masaya Sawamura (Ibaraki University), “Quantum Chemical and Experimental Studies on Copper-catalyzed Enantioselective Direct Alkynylation of Aldehydes with Terminal Alkynes”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC-6), Gyeongju Hilton Hotel, Gyeongju, Korea, Jul. 10-13, 2013.
 19. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Homogeneous-like and Better-than-homogeneous, International Symposium of Homogenous Reactivity”, Ibaraki University, Mito, Japan, Jul. 14-15, 2013.
 20. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Transition Metal Catalyzed Directed Borylation of $C(sp^2)-H$ and $C(sp^3)-H$ Bonds with Immobilized Phosphine Ligands”, The 6th Homogeneous Catalysis Symposium in Wuhan, Wuhan University, Wuhan, China, Aug. 30, 2013.
 21. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Transition Metal Catalyzed Directed Borylation of $C(sp^2)-H$ and $C(sp^3)-H$ Bonds with Immobilized Phosphine Ligands”, Asian Core Program Award Lecture at University of Science and Technology of China, Heifei, China, Sep. 2, 2013.
 22. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Transition Metal Catalyzed Directed Borylation of $C(sp^2)-H$ and $C(sp^3)-H$ Bonds with Immobilized Phosphine Ligands”, Asian Core Program Award Lecture at Shanghai Institute of Organic Chemistry, Shanghai, China, Sep. 3, 2013.
 23. Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), “Enantioselective Conjugate Addition and Allylic Substitution with Alkylboranes Catalyzed by Copper(I) Complexes”, 210th International Symposium on Carbanion Chemistry (ISCC-10), Doshisha University, Kyoto, Japan, Sep. 23-26, 2013.
 24. Tetsuya Taketsugu, Min Gao, Andrey Lyalin, Daisuke Horita, Makito Takagi, Yuriko Ono, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Theoretical approach to catalytic property and reaction pathway of small gold clusters”, The 9th Nanjing-Hokkaido-NIMS/MANA Joint Symposium on the Cutting Edge Chemistry, Nanjing, China, Oct. 11-13, 2013.
 25. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Systematic Exploration of Transition State Structures for Organic Reactions by the Artificial Force Induced Reaction (AFIR) Method”, 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Todai-ji Culture Center, Nara, Japan, Dec. 2-6, 2013.
 26. Tetsuya Taketsugu, Aya Sato, Yu Harabuchi, and Yusuke Otani (Hokkaido University), “Ab initio Molecular Dynamics Approach to Tunneling Splitting Calculations”, 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Todai-ji Culture Center, Nara, Japan, Dec. 2-6, 2013.
 27. Seiji Mori (Ibaraki University), “Computational studies on C-C and C-H bond activation reactions in organic and biological chemistry”, 2013 International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCPC), The Tide Resort, Ampur. Mueng, Cholburi, Thailand, Dec. 9-12, 2013.
 28. Seiji Mori (Ibaraki University), “ASEAN Initiative to foster next generation talents to lead environmentally friendly food production, technological innovation and regional planning-Local Sustainability Course at Ibaraki University”, Kasetsart University-Ibaraki University symposium, Kasetsart University, Bangkok, Thailand, Dec. 13, 2013.
 29. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Phosphine-Functionalized Solid-Liquid Interfaces for Ideal Organic Synthesis”, Hanoi University of Science–Vietnam National University Hokkaido University Seminar Series, Hanoi, Vietnam, Mar. 10, 2014.

30. Seiji Mori (Ibaraki University), "Theoretical studies on biosynthesis of prostaglandin G2 by cyclooxygenase-2", 18th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 18), Faculty of Science at Si Racha, Kasetsart University Si Racha Campus, and Ambassador City Jomtien, Thailand, Mar. 17-19, 2014.
31. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Copper-catalyzed Direct Allylic Alkylation of Terminal Alkynes: Stereoselective Synthesis of Chiral Skipped Enynes", The International Startup Symposium of Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (III), National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan, Apr. 19-22, 2014.
32. Satoshi Maeda (Hokkaido University), "Automated Search for Chemical Reaction Pathways with Quantum Chemical Calculations", Recent Advances in Modeling Rare Events: Methods and Applications (RARE2014), Vasundhara Sarovar Premiere Resort, Kerala, India, May 29-Jun. 1, 2014.
33. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Solid Surfaces as Frontiers for Creating Active Metal Catalysts", Chemistry Department Seminar, Hanyang University, Seoul, Korea, Jun. 16, 2014.
34. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Solid Surfaces as Frontiers for Creating Active Metal Catalysts", Chemistry Department Seminar, Pohang University of Science and Technology, Pohang, Korea, Jun. 17, 2014.
35. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Solid Surfaces as Frontiers for Creating Active Metal Catalysts", Chemistry Department Seminar, Hankuk University of Foreign Studies, Yongin, Korea, Jun. 18, 2014.
36. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Solid Surfaces as Frontiers for Creating Active Metal Catalysts", Chemistry Department Seminar, Korea University, Seoul, Korea, Jun. 19, 2014.
37. Tetsuya Taketsugu and Yu Harabuchi (Hokkaido University), "Theoretical Elucidation of Excited-State Elementary Processes: Reaction, Vibration, and Tunneling," New Frontiers in Chemistry: The 10th Hokkaido Univ.-Nanjing Univ. Joint symposium, Sapporo and Rusutsu, Hokkaido, Japan, Aug. 22-23, 2014.
38. Seiji Mori (Ibaraki University), "Computational studies of mechanistic insight into prostaglandin synthases", Shanghai City Symposium of Computational and systems biology, Shanghai, China, Jul. 24-26, 2014.
39. Seiji Mori (Ibaraki University), "DFT studies on metal-catalyzed molecular activation reactions toward rational catalyst design", Chemistry Department Seminar, Ubon Rachathani University, Ubon Rachathani, Thailand, Aug. 13, 2014.
40. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Hydrogen-Bonding with a Nonpolar sp^3 -C-H Bond in Enantioselective Cooperative Copper(I) Catalysis", 8th Asian European Symposium on Metal-Mediated Efficient Organic Synthesis, Cezme/Izmir, Turkey, Sep. 7-10, 2014.
41. Seiji Mori (Ibaraki University), "DFT studies on metal-catalyzed molecular activation reactions toward rational catalyst design", Chemistry Department Seminar, Philipps University-Marburg, Germany, Sep. 8, 2014.
42. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Design of Chiral Metal Catalysts Based on Cooperative Hydrogen Bonding", 第24回 光学活性化合物シンポジウム、日本薬学会長井記念館 長井記念ホール、東京都渋谷区、2014年10月10日
43. Hirohisa Ohmiya, Ayumi Harada, Yusuke Makida, Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Copper-Catalyzed Enantioselective Allylic Alkylation of Terminal Alkynes", 18th Malaysian International Chemical Congress (18MICC), Malaysia, Kuala Lumpur, Nov. 3-5, 2014.
44. Masaya Sawamura, Takaoki Ishii, Hirohisa Ohmiya, Martin Christoph Schwarzer, Ryosuke Konno, Seiji Mori (Hokkaido University), "Copper-catalyzed Asymmetric Synthesis of β -Lactams through Coupling between Alkynes and Nitrones", Vietnam Malaysia International Chemical Congress (VMICC), Vietnam, Hanoi, Nov. 7-9, 2014.
45. Hirohisa Ohmiya, Kazunori Nagao, Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Phosphine-Catalyzed Carboboration of Alkynoates with Alkyl-, Alkenyl-, and Arylboranes", Vietnam Malaysia International Chemical Congress (VMICC), Vietnam, Hanoi, Nov. 7-9, 2014.
46. Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Phosphine-Catalyzed Carboboration of Alkynoates with Alkyl-, Alkenyl-, and Arylboranes", The 4th Junior International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia 2014 (JICCEOCA-4), Chulabhorn Research Institute (CRI) and Chulabhorn Graduate Institute (CGI), Thailand, Nov. 28-Dec. 1, 2014.
47. Tetsuya Taketsugu and Yu Harabuchi (Hokkaido University), "Theoretical Studies on Excited-State Elementary Processes", Vietnam Malaysia International Chemical Congress (VMICC), Vietnam, Hanoi, Nov. 7-9, 2014.

48. Seiji Mori (Ibaraki University), "Computational Studies of Mechanistic Insight into Syntheses of Prostaglandins and Related Signaling Compounds", Vietnam Malaysian International Chemical Congress (VMICC), Hanoi, Vietnam, Nov. 7-9, 2014.
49. Satoshi Maeda (Hokkaido University), "Automated Exploration of Chemical Structures and Reaction Pathways", The 2nd International Symposium for Young Chemists on Stimuli-Responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules, Osaka University, Toyonaka, Osaka, Japan, Dec 9-10, 2014.
50. Seiji Mori (Ibaraki University), "Theoretical Studies of Molecular Activation Reactions -Mechanistic Insights and Rational Design of Catalysis-", The Second International Workshop on Computational Science and Engineering (IWCSE2014), Hong Kong, Dec. 13-16, 2014.
51. Satoshi Maeda (Hokkaido University), "Development and Applications of Methods for Automated Search of Chemical Structures and Reaction Pathways", Second China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-II), RIKEN AICS seminar room, Kobe, Hyogo, Japan, Jan. 20-23, 2015.
52. Seiji Mori (Ibaraki University), "Computational studies on complex mechanisms of organic and biological reactions", International workshop on Theoretical Chemistry on Functional Biomolecular Systems, Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Feb. 10, 2015.
53. Seiji Mori (Ibaraki University), "Overview of the College of Science, Ibaraki University", The second Kasetsart University-Ibaraki University symposium, Ibaraki University, Mito Campus, Feb. 17, 2015.
54. Tuanjai Somboon, Matthew Paul Gleeson, Kiattawee Choowongkamon, Seiji Mori, Koichi Kato, Tadashi Satoh, Supa Hannongbua (Ibaraki University), "Enzyme Structure: Simulations Meet Crystallization", The second Kasetsart University-Ibaraki University symposium, Ibaraki University, Mito Campus, Feb. 17, 2015.
55. Seiji Mori (Ibaraki University), "Computational chemistry researches on organic/organometallic/biological reactions", Faculty of Science, Chemistry Department Seminar, Universiti Brunei Darussalam, Brunei, Mar. 12, 2015.
56. Seiji Mori (Ibaraki University), "Computational Studies on C-C and C-H Bond Cleavage Reactions in Organometallic/Biological Chemistry", Department Seminar, Department of Physics and Materials Science, City University of Hong Kong, Hong Kong, Mar. 16, 2015.
57. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Hydrogen Bonding with a Nonpolar sp^3 -C-H Bond in Enantioselective Cooperative Metal Catalysis", Organic Chemistry Symposia - Sendai (RSC Road Show), Tohoku University, Sendai, Japan, Jun. 1, 2015.
58. Tetauya Taketsugu (Hokkaido University), "Theoretical study on excited-state elementary processes: potential energy surfaces and on-the-fly dynamics", Seminar at the Chemistry Department, Universite de Strasbourg, Strasbourg, France, Jun. 9, 2015.
59. Masaya Sawamura, Takaoki Ishii, Ryo Watanabe, Seiji Mori, Toshimitsu Moriya, Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), "Hydrogen Bonding with a Nonpolar sp^3 -C-H Bond in Enantioselective Cooperative Copper Catalysis", 17th International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHC-17), Utrecht, Netherlands, Jul. 12-15, 2015.
60. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), "Bifurcation of reaction pathway: global reaction route mapping and excited-state ab initio MD", Telluride Science Research Center (TSRC) workshop," Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases", Telluride, Colorado, USA, Jul. 27-Aug. 7, 2015.
61. Seiji Mori (Ibaraki University), "Computational Studies on Mechanistic Insights into Prostaglandin Syntheses", International Conference on Biosciences (IcoBio) 2015, Bogor, Indonesia, Aug. 5-7, 2015.
62. Seiji Mori (Ibaraki University), "Computational Studies on Mechanistic Insights into Prostaglandin Syntheses", Seminar at department of biochemistry, Kasetsart University, Bangkok, Thailand, Aug. 11, 2015.
63. Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Polystyrene-cross-linking Bisphosphine Ligands: Applications to Challenging Ni Catalysis", Kick-off Symposium on Advanced Research Network for Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Tohoku University, Sendai, Japan, Aug. 25-26, 2015.
64. Satoshi Maeda (Hokkaido University), "Global Reaction Route Mapping (GRRM) Strategy for Automated Exploration of Reaction Pathways", The 4th Joint Symposium between Hokkaido University and Harbin Engineering University, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Aug. 31, 2015.
65. Satoshi Maeda (Hokkaido University), "Development of the Global Reaction Route Mapping Strategy for Catalysis", 3rd Challenges in Computational Homogeneous Catalysis, Lovik Conference

- Center, Stockholm, Sweden, Sep. 3–4, 2015.
66. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Heterogeneous Transition Metal Catalysis with Phosphine-cross-linked Polystyrenes”, BIT’s 6th Annual Global Congress of Catalysis, Xi’an, China, Sep. 24–26, 2015.
 67. Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), “Carboboration, Silaboration and Diboration through Organocatalysis”, BIT’s 6th Annual Global Congress of Catalysis, Xi’an, China, Sep. 24–26, 2015.
 68. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Designer Phosphine-Polymer Hybrids for Efficient Organometallic Catalysis”, Shaanxi Normal University 特別講演会, Shaanxi Normal University, Xi'an, China, Sep. 25, 2015.
 69. Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), “Carboboration, Silaboration and Diboration through Organocatalysis”, Shaanxi Normal University 特別講演会, Shaanxi Normal University, Xi'an, China, Sep. 25, 2015.
 70. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Designer Phosphine-Polymer Hybrids for Efficient Organometallic Catalysis”, Lanzhou University 有機分子化学特別講演会, Lanzhou University, Lanzhou, China, Sep. 29, 2015.
 71. Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), “Carboboration, Silaboration and Diboration through Organocatalysis”, Lanzhou University 有機分子化学特別講演会, Lanzhou University, Lanzhou, China, Sep. 29, 2015.
 72. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Development of Automated Reaction Path Search Methods and Their Applications to Photochemical Reactions”, The 19th East Asian Workshop on Chemical Dynamics, Voyager Resort, Gold Coast, Australia, Oct. 5–7, 2015.
 73. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Ab initio excited-state molecular dynamics approach to photoreactions”, The 6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Smolenice Castle, Bratislava, Slovakia, Oct. 11–15, 2015.
 74. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Global Reaction Route Mapping (GRRM) Strategy for Systematic Understanding of Photochemical Reactions”, The 6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Smolenice Castle, Bratislava, Slovakia, Oct. 11–15, 2015.
 75. Masato Kobayashi (Hokkaido University), “Divide-and-Conquer Method for Large-Scale Quantum Chemical Calculations”, The 11st Hokkaido Univ.-Nanjing Univ. Joint symposium: 2015 HU-NU-NIMS/MANA Joint symposium, Nanjing, China, Oct. 16–18, 2015.
 76. Seiji Mori (Ibaraki University), “Theoretical Studies of Molecular Activation Reactions -Mechanistic Insights and Rational Design of Catalysis-“, Molecular Designs for Advanced Materials: Workshop and Conference, Chiang Mai, Thailand, Nov. 24–27, 2015.
 77. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Development of the Global Reaction Route Mapping (GRRM) Strategy toward Systematic Understanding of Organic and Photochemical Reactions”, Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems, ICIQ Auditorium, Tarragona, Spain, Nov. 25–27, 2015.
 78. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical exploration of photo-isomerization dynamics”, 2015 SNU-HU Chemistry Symposium on "Electrons in Chemistry", Hoam Faculty House, Seoul, Republic of Korea, Nov. 26–27, 2015.
 79. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Phosphine-cross-linked polystyrenes as platforms for producing C–H functionalization catalysts”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.
 80. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Phosphine-cross-linked polystyrenes as platforms for producing highly active heterogeneous transition metal catalysts”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.
 81. Satoshi Maeda, Yu Harabuchi, Min Gao, Guixiang Zeng, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Automated exploration of adiabatic and nonadiabatic channels in organometallic complexes”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.
 82. Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Automated search for minimum energy conical intersection and seam of crossing geometries near the Franck-Condon region: Toward prediction of fluorescence quantum yields”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.
 83. Kohei Uosaki, G. Elumalai, Hidenori Noguchi, Andrey Lyalin, and Tetsuya Taketsugu (National Institute for Materials Science, Hokkaido University), “Novel materials for an efficient electrocatalyst for oxygen reduction reaction: Insulating boron nitride nanosheet on an inert gold substrate”, 2015

- International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.
84. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Ab initio dynamics study on photo-chemical reactions”, 2016 Joint Japan-Thai-Vietnam Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Ibaraki University, Moto Japan, Jan. 18, 2016.
 85. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Exploration of Adiabatic and Nonadiabatic Channels in Organic Molecules and Organometallic Complexes”, the Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), Kaohsiung, Taiwan, Jan. 25–28, 2016.
 86. Seiji Mori (Ibaraki University), “Theoretical Studies of Molecular Activation Reactions-Mechanistic Insights and Rational Design of Catalysis-”, the Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), Kaohsiung, Taiwan, Jan. 25–28, 2016.
 87. Masaya Sawamura, Tomoya Harada, Hajime Shimada, and Tomohiro Iwai (Hokkaido University), “Phosphine-cross-linked Polystyrenes: Application to Ni-catalyzed Amination of Chloroarenes”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON 2016), Bangkok, Thailand, Feb. 9–11, 2016.
 88. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Phosphine-branched Polystyrenes as Platforms for Creating Highly Active Metal Catalysts”, The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium "Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Feb. 23–24, 2016.
 89. Yosuke Sumiya, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Kinetic analysis for complex reaction networks: Application to Claisen rearrangement”, Strasbourg-Hokkaido 1st student winter workshop, University de Strasbourg, Strasbourg, France, Mar. 14–15, 2016.
 90. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Site-isolation of Phosphine Ligands through Solid-Immobilization: Impact on Activity and Selectivity in Transition Metal Catalysis”, Peking University & Hokkaido University Joint Seminar on Organic Chemistry and Chemical Biology, Peking, China, May. 26–27, 2016.
 91. Seiji Mori (Ibaraki University), “Introduction of Quantum Beam Science and Applications to Chemistry and Related Sciences”, 8th International Kasetsart University Science and Technology Annual Research Symposium, Bangkok, Thailand, Jun. 2–3, 2016.
 92. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Development of New Solid-immobilized Phosphines for Solving Problems in Organic Synthesis”, 21st International Conference on Phosphorus Chemistry, Kazan, Russia, Jun. 5–10, 2016.
 93. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Global Reaction Route Mapping (GRRM) Strategy for Automated Exploration of Reaction Pathways”, The 12th Hokkaido University–Nanjing University–NIMS/MANA Joint Symposium, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jul. 29, 2016.
 94. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Medium-ring-forming Gold-catalyzed Alkyne Cyclization Enabled by Hollow-shaped Phosphine Ligands”, JST–NTU Joint Seminar on Sustainable Synthesis and Catalysis, Nanyang Technological University, Singapore, Aug. 3, 2016.
 95. Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), “Construction of All-Carbon Quaternary Stereogenic Centers through Chiral Naphthol-NHC-Cu(I)-catalyzed C–H Allylic Alkylations”, International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016, Borneo Convention Center, Kuching, Malaysia, Aug. 15–18, 2016.
 96. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Ab initio study of photo-isomerization reaction dynamics”, International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016, Borneo Convention Center, Kuching, Malaysia, Aug. 15–18, 2016.
 97. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study of substituent effects on excited-state dynamics of stilbene”, 2nd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2016, Yokohama City University, Kanagawa, Japan, Sep. 21–22, 2016.
 98. Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), “Copper-Catalyzed Asymmetric Allylic Substitution with Phenol-N-Heterocyclic Carbene Chiral Ligand”, 2016 Korean Society of Organic Synthesis (KSOS) Annual Symposium, Daejeon, Korea, Sep. 29–30, 2016.
 99. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Polystyrene-cross-linking Bisphosphine. Synthesis, Properties, and Application to C–O Activation Ni Catalysis”, International Symposium on C–O Activation, Himeji Chamber of Commerce and Industry, Hyogo, Japan, Oct. 25–27, 2016.
 100. Takuya Ishitsuka, Yasuhiro Okuda, Robert K. Szilagy, Yasushi Nishihara, and Seiji Mori (Hokkaido University, Ibaraki University), “Theoretical Studies on Palladium-Catalyzed exo-Selective Cyanoesterification of Methyl Cyanofornate onto Norbornene”, International Symposium on C–O Activation, Himeji Chamber of Commerce and Industry, Hyogo, Japan, Oct.

- 25–27, 2016.
101. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “On-the-fly dynamics study on the photoisomerization mechanism of stilbene and its derivative”, Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan, Oct. 26–28, 2016.
 102. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Cu-catalyzed Asymmetric Direct Allylic Alkylation of Terminal Alkynes and Azoles: Studies with Phenol-Carbene Chiral Ligands”, The 11th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Daejeon, Korea, Oct. 27–30, 2016.
 103. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Development of Automated Reaction Path Search Methods toward Systematic Understanding and Design of Organic Reactions”, This lecture was delivered at 10 research institutes, Ludwig-Maximilians-Universität (München) on 10-Oct., Max-Planck-Institute für Kohlenforschung (Düsseldorf) on 12-Oct., ETH (Zürich) on 14-Oct., Princeton Univ. on 17-Oct., Merck Research Laboratories on 19-Oct., MIT on 20-Oct., Harvard Univ. on 21-Oct., Caltech on 24-Oct., Univ. of California Berkeley on 25-Oct., Stanford Univ. on 26-Oct., in the lecture tour of the Merck-Banyu Lectureship Award (MBLA) 2015.
 104. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Ab Initio Approach to Photoreaction Dynamics”, Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai, Thailand, Nov. 14–16, 2016.
 105. Seiji Mori (Ibaraki University), “Theoretical Insights into Molecular Activation Reactions”, Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai, Thailand, Nov. 14–16, 2016.
 106. Seiji Mori (Ibaraki University), “The Wonder of Enzymes with Ingenious Mechanisms”, The 4th International Symposium for Young Chemists on Stimuli-Responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules, Osaka University, Osaka, Japan, Dec. 12–13, 2016.
 107. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Ligand Design for Efficient Organic Synthesis”, The 22nd Nagoya Medal of Organic Chemistry, Nagoya University, Aichi, Japan, Jan. 27, 2017.
 108. Masaya Sawamura, Hirohisa Ohmiya, Guixiang Zeng, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Cu-catalyzed Asymmetric Direct Allylic Alkylation of Terminal Alkynes and Azoles: Mechanism and Construction of Quaternary Stereogenic Centers”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2017 (PACCON 2017), Green Convergence on Chemical Frontier, Bangkok, Thailand, Feb. 2–3, 2017.
 109. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Ab initio MD study of branching reactions in the excited-state potential energy surface”, GAMESS7557SSEMAG Palindromic birthday theory symposium, Kauai, USA, Jan. 15–18, 2017.
 110. Seiji Mori (Ibaraki University), “Mechanistic Insights into Molecular Activation Reactions Based on Computational Chemistry”, 10th International Conference on Computational Physics (ICCP10), Macao, China, Jan. 16–20, 2017.
 111. Seiji Mori (Ibaraki University), “Theoretical Studies of Molecular Activation Reactions -Mechanistic Insights and Rational Design of Catalysis-”, Fifth Modeling of Chemical and Biological (Re)activity (MCBR-5), Chennai, India, Feb. 18–21, 2017.
 112. Hirohisa Ohmiya (Hokkaido University), “Asymmetric Copper Catalysis with Phenol-Carbene Chiral Ligands”, 日本化学会第 97 春季年会 アジア国際シンポジウム, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, Mar. 18, 2017.
 113. Seiji Mori (Ibaraki University), “Computational Studies of Biosyntheses of Prostaglandins and Related Signaling Compound”, Sixth Georgian Bay International Conference on Bioinorganic Chemistry, Parry Sound, Ontario, Canada, 2017, May 23–27.
 114. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Exploring adiabatic and nonadiabatic pathways for understanding and designing chemical reactions”, 33rd symposium on chemical kinetics and dynamics, Nagoya, Japan, Jun. 7–9, 2017.
 115. Tomohiro Iwai (Hokkaido University), “Polystyrene-Cross-Linking Phosphine Ligands for Polystyrene-Cross-Linking Phosphine Ligands for Producing Highly Active Metal Catalysts”, International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, Ho Chi Minh City, Vietnam, Jun. 8–10, 2017.
 116. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical approach to reaction-path bifurcation”, International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, Ho Chi Minh City, Vietnam, Jun. 8–10, 2017.
 117. Masato Kobayashi (Hokkaido University), “Analyzing Quantum Chemical Calculation Results with Informatics Techniques: Toward Application to Catalyst Development” International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, Ho Chi Minh City, Vietnam, Jun. 8–10, 2017.

118. Takeshi Iwasa (Hokkaido University), “Theoretical Spectroscopy beyond the Dipole Approximation” International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, Ho Chi Minh City, Vietnam, Jun. 8-10, 2017.
119. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Ab initio global reaction route mapping in thermal and photochemical reactions”, Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 (CPMD 2017), Tsukuba, Japan, Oct. 18-20, 2017.
120. Min Gao (Hokkaido University), “Theoretical study of Structure-dependent catalytic activity of gold clusters”, The 13th Jiangxing University-Nanjing University-Hokkaido University-NIMS Joint Symposium, Jiaxing, China, Oct. 27-28, 2017.
121. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical Suggestion and Experimental Proof for Novel Catalyst: Boron Nitride with Gold”, The 2017 International Conference on Functional Carbons (ICFC), Taipei, Taiwan, Nov. 1-4, 2017.
122. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Organometallic Catalysis with Polystyrene-Cross-Link Phosphines”, 1st Singapore Japan Germany Trilateral Symposium on Precision Synthesis & Catalysis, Nanyang, Singapore, Nov. 20-21, 2017.
123. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “The 5th International Symposium on AMBITIOUS LEADER’S PROGRAM Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science”, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Nov. 21, 2017.
124. Seiji Mori (Ibaraki University), “Mechanistic Insights Into Transition-Metal Catalyzed Molecular Activation Reactions”, Eighth edition of Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8), Mumbai, India, Dec. 15-17, 2017.
125. Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Systematic exploration of path networks of chemical reactions by the AFIR method implemented in the GRRM17 program”, Eighth edition of Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 8), Mumbai, India, Dec. 15-17, 2017.
126. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Transition Metal Catalysis of Polystyrene-Cross-Linking Bisphosphines”, International Conference on Chemistry for Human Development (ICCHD-2018), Kolkata, India, Jan. 8-10, 2018.
127. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Ligand Design for Efficient Organic Synthesis”, Lecture at IIT Madras, Chennai, India, Jan. 12, 2018.
128. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “High-performance Transition Metal Catalysts with Polystyrene-cross-linking Phosphine Ligands”, Pure and Applied Chemistry International Conference 2018, Hat Yai, Thailand, Feb. 7-9, 2018.
129. Masaya Sawamura (Hokkaido University), “New Concepts from Ligand Design”, Institute Seminar, Chulabhorn Research Institute, Bangkok, Thailand, Feb. 12, 2018.
130. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretically inspired new catalyst: boron nitride with gold”, 2018 Mesilla Chemistry Workshop on Interplay between Theory and Experiment in Nanocatalysis, Mesilla, USA, Feb. 3-7, 2018.
131. Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study of reactivity of gold clusters: Structural effects and support effects”, APS March Meeting "Nano and sub-nano clusters as the smallest and highly-tunable interfaces", Los Angeles, USA, Mar. 5-9, 2018.
132. Min Gao (Hokkaido University), “Theoretical study on the geometry and size effect on the catalytic activity of gold clusters”, International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) 2018, Siem Reap, Cambodia, Mar. 7-10, 2018.
133. Tomohiro Iwai (Hokkaido University), “Multipoint Solid-Supported Phosphine Ligands for Efficient Organometallic Catalysis”, 日本化学会第 98 春季年会 アジア国際シンポジウム, 日本大学 船橋キャンパス, 千葉県船橋市, Mar. 20-23, 2018.

- ② 口頭発表 (国内会議 103 件→102 件に修正、国際会議 15 件)
 (国内会議 No. 91 の発表については、前述「(1)原著論文発表」において取り下げられた論文 No. 133 に関連する発表のため、件数を修正するものです)

<国内会議>

1. 長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“銅触媒とアルキルボランを用いるキラルリン酸アリル類の立体分岐型アルキル化反応”、第 102 回有機合成シンポジウム 2012 年【秋】、早稲田大学国際会議場、2012 年 11 月 8-9 日
2. 佐藤辰紀・榎田祐輔・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“官能基化 N-ヘテロサイクリック

- カルベン-銅錯体触媒による末端アルキンと第1級リン酸アリル類の γ 位選択的カップリング反応”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
3. 若松鷹道・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“銅触媒を用いたアルキルボラン、アルキノエート、求電子剤の3成分カップリング反応”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 4. 長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“銅触媒による2-ブテン-1,4-ジオール誘導体とアルキルボランの立体収束型アルキル化反応”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 5. 北條健太郎・志渡義教・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“銅触媒によるアルキルボランのエナンチオ選択的アリル位置換反応”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 6. 秋山裕樹・岩井智弘・澤村正也 (北大院理)、“リン酸型アニオン性官能基を有する光学活性含窒素複素環カルベンの合成と銅触媒不斉共役付加反応への応用”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 7. 石井孝興・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“光学活性ヒドロキシアミノホスフィン-銅錯体触媒による末端アルキンとニトロンの不斉衣笠反応”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 8. 原田友哉・岩井智弘・澤村正也 (北大院理)、“ポリスチレン三脚架橋型ホスフィンの設計・合成と遷移金属触媒によるC-HおよびC-Cl結合変換反応への応用”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 9. 田中遼太郎・原田友哉・岩井智弘・澤村正也 (北大院理)、“シリカ三脚担持型ホスフィン-パラジウム触媒による塩化アリール類のクロスカップリング反応”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 10. 岩井智弘・田中遼太郎・原田友哉・澤村正也 (北大院理)、“シリカ三脚担持型ホスフィンの合成と構造解析：触媒的C(sp³)-H結合ホウ素反応への応用”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 11. 小西菖太・川守田創一郎・岩井智弘、Tajuddin H., Harrisson P., Steel, Patrick G., Marder, Todd B., 澤村正也 (北大院理)、“シリカ担持かご型ホスフィン-イリジウム触媒によるキノリン誘導体の位置選択的C-H結合直接ホウ素化反応”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 12. 村上遼・川守田創一郎・岩井智弘・澤村正也 (北大院理)、“シリカ担持かご型ホスフィン-イリジウム触媒による不活性C(sp³)-H結合の直接ホウ素化反応”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 13. 前田理・原渕祐・武次徹也・諸熊奎治 (北大院理)、“GRRM/AFIR法による光環化付加反応機構の検討”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 14. 原渕祐・前田理・武次徹也・嶺澤範行・諸熊奎治 (北大院理)、“GRRM法とSF-TDDFT法を組み合わせた最小エネルギー円錐交差構造自動探索：大きな分子への適用へ向けて”、日本化学会第93春季年会、立命館大学 びわこ・くさつキャンパス、2013年3月22-25日
 15. Min Gao, Satoshi Maeda, Andrey Lyalin, and Tetsuya Taketsugu (北大院理)、“Finding chemical bond activation pathway catalyzed by metal clusters: A case study of H₂ dissociation on Au_n (n = 1-11)”、第16回理論化学討論会、福岡市健康づくりサポートセンター、福岡市、2013年5月15-17日
 16. 石井孝興・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“不斉ヒドロキシアミノホスフィン-銅錯体の協同触媒作用に基づく β -ラクタムの立体選択的合成”、日本化学会北海道支部2013年夏期研究発表会、北見工業大学、北見市、2013年7月20日
 17. 岩井智弘・原田友哉・田中遼太郎・澤村正也 (北大院理)、“固相多点担持ホスフィンの開発と触媒的C(sp²)-ClおよびC(sp³)-H結合変換反応への応用”、第60回有機金属化学討論会、学習院大学学習院創立百年記念会館、東京都豊島区、2013年9月12-14日
 18. 岩井智弘・原田友哉・田中遼太郎・澤村正也 (北大院理)、“シリカ三脚担持型ホスフィンの設計・合成：配位不飽和金属錯体の選択的形成と触媒反応への応用”、第112回触媒討論

- 会、秋田大学手形キャンパス、秋田市、2013年9月18-20日
19. 原田友哉・岩井智弘・澤村正也（北大院理）、“ポリスチレン三点架橋型トリアリールホスフィン配位子の開発と不活性結合変換反応への応用”、第112回触媒討論会、秋田大学手形キャンパス、秋田市、2013年9月18-20日
 20. Andrey Lyalin, Min Gao, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu（北大院理）、“Interface effects on H₂ adsorption and dissociation on gold clusters supported on the rutile TiO₂(110) surface”, 第7回分子科学討論会、京都テルサ、京都市、2013年9月24-27日
 21. 吉村 誠慶・Gleeson Paul・Hannongbua Supa・森 聖治（茨城大理）、“シクロオキシゲナーゼ-2によるプロスタグランジン G₂ の生合成経路に関する酵素の効果の研究”、第7回分子科学討論会、京都テルサ、京都市、2013年9月24-27日
 22. 石井孝興・大宮寛久・澤村正也（北大院理）、“キラル銅触媒を用いる末端アルキンとニトロンからのβ-ラクタムの不斉合成”、第43回複素環化学討論会、長良川国際会議場、岐阜市、2013年10月17-19日
 23. 原潤祐・前田理・小野ゆり子・中山哲・武次徹也（北大院理）、“全対称分岐及び多方向分岐に関する理論的研究”、第12回HSSワークショップ、北海道大学、札幌市、2014年3月14日
 24. 若松鷹道・大宮寛久・澤村正也（北大院理）、“銅触媒によるアルキルボラン/アルキノエート/求電子剤三成分カップリングを用いた多置換アルケンの合成”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 25. 石井孝興・大宮寛久・澤村正也（北大院理）、“光学活性ヒドロキシアミノホスフィン-銅錯体触媒によるα-ケトエステル誘導体のエナンチオ選択的アルキニル化反応”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 26. 北條健太郎・志渡義教・大宮寛久・澤村正也（北大院理）、“アルキルボランと第1級塩化アリル類のエナンチオ選択的銅触媒クロスカップリングによる第四級不斉炭素中心の構築”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 27. 長尾一哲・大宮寛久・森聖治・澤村正也（北大院理）、“銅触媒によるアルキルボランのγ位選択的アリル化反応の機構解析”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 28. 安田優人・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也（北大院理）、“銅触媒による第2級アルキルボランとリン酸アリルのγ位選択的立体特異的カップリング反応”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 29. 原田安祐美・榎田祐輔・大宮寛久・澤村正也（北大院理）、“銅触媒による末端アルキンのエナンチオ選択的アリル位アルキル化反応”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 30. 村山大明・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也（北大院理）、“銅(I)触媒による分子内アルケンヒドロアルコキシ化反応”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 31. 島田肇・原田友哉・岩井智弘・澤村正也（北大院理）、“両親媒性高分子三点架橋型ホスフィンの合成とパラジウム触媒による水中クロスカップリング反応への応用”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 32. 村上遼・岩井智弘・澤村正也（北大院理）、“シリカ担持モノホスフィン-イリジウム触媒による位置選択的C(sp³)-Hホウ素化反応：配向基の拡張”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 33. 角田圭・村上遼・岩井智弘・澤村正也（北大院理）、“シリカ担持モノホスフィン-イリジウム触媒による小員環化合物の位置および立体選択的C-Hホウ素化反応”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 34. 植松遼平・山本英治・前田理・伊藤肇・武次徹也（北大院理）、“GRRM/AFIR法によるシリルボラン法の反応機構解明：特異なアニオンリレーに伴う極性転換”、日本化学会第94春季年会、名古屋大学東山キャンパス、名古屋市、2014年3月27-30日
 35. 前田理・武次徹也・諸熊奎治（北大院理）、“単成分人工力誘起反応（SC-AFIR）法”、第17回理論化学討論会、名古屋大学（東山キャンパス）ES総合館、愛知県名古屋市、2014年5月22-24日

36. Schwarzer Martin Christoph, Konno Ryosuke, Ishii Takaoki, Ohmiya Hirohisa, Mori Seij and Sawamura Masaya (茨城大理)、“Mechanistic insights into the asymmetric Kinugasa reaction of nitrones with terminal alkynes by Copper catalysis”、第 8 回分子科学討論会 2014、広島大学 東広島キャンパス、広島県東広島市、2014 年 9 月 21-24 日
37. 足立将・高敏・Andrey Lyalin・武次徹也(北大院理)、“新規酸素還元触媒窒化ホウ素の炭素ドーブ効果に関する理論的研究”、化学系学協会北海道支部 2015 年冬季研究発表会、北海道大学学術交流会館、北海道札幌市、2015 年 1 月 27-28 日
38. Heng Zhang, Ayumi Harada, Hirohisa Ohmiya, Masaya Sawamura (北大院理)、“Construction of Quaternary Stereogenic Carbon Centers through Copper-catalyzed Enantioselective Direct Allylic Alkylation of Heteroarenes”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
39. 若松鷹道・大宮寛久・澤村正也(北大院理)、“銅(I)触媒と分子状水素によるアルキンの水素化反応”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
40. Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, Masaya Sawamura (北大院理)、“Anti-selective Carboboration, Silaboration and Diboration of Alkynoates through Phosphine Organocatalysis”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
41. 村上遼・岩井智弘・澤村正也(北大院理)、“パラジウム触媒による 2-アルキルピリジン類の側鎖 C(α)位アリル化反応”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
42. 角田圭・高橋諒丞・鈴木健太郎・保田諭・岩井智弘・澤村正也・村越敬(北大院理)、“単層グラフェン修飾酸化チタン電極の光整流特性”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
43. Tomoya Harada, Tomohiro Iwai, Masaya Sawamura (北大院理)、“Development of Multifold Cross-linked Polystyrene Bisphosphine Hybrids and Its Application to Nickel-catalyzed Cross-coupling Reactions”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
44. 高敏・前田理・村上遼・岩井智弘・澤村正也・武次徹也(北大院理)、“表面固定化 Ir 触媒による高位置選択的 C-H ホウ素化反応に関する理論的研究：GRRM/SC-AFIR 法の応用”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
45. 植松遼平・前田理・Djamaladdin G. Musaev・武次徹也(北大院理)、“パラジウム(II)触媒を用いるチオベンズアニリドの C-H 官能基化/分子内 C-S 結合形成反応の機構解析：GRRM/AFIR 法による理論的研究”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
46. 坂智尋・植松遼平・前田理・武次徹也(北大院理)、“GRRM/AFIR 法によるトリエチルボラン/酸素系の自動酸化機構に関する理論的研究”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
47. 吉村誠慶・内田ひかる・落合純・鈴木潤・近藤圭佑・樋口恒彦・森聖治(茨城大理)、“鉄(III)ポルフィリン-チオレート錯体の構造と電子状態に関する研究”、日本化学会第 95 春季年会、日本大学理工学部 船橋キャンパス/薬学部、千葉県船橋市、2015 年 3 月 26-29 日
48. 小林正人・武次徹也(北大院理)、“有限温度 MP2 法と密度行列 Laplace MP2 法：関連性と分割統治(DC)計算への適用”、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 大阪大学会館、大阪府豊中市、2015 年 5 月 20-22 日
49. 岩佐豪・武次徹也(北大院理)、“非一様電場と分子振動の相互作用と近接場赤外吸収分光への応用”、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 大阪大学会館、大阪府豊中市、2015 年 5 月 20-22 日
50. 住谷陽輔・前田理・武次徹也(北大院理)、“速度論に基づく複雑反応経路網の解析：異性化反応への応用”、第 18 回理論化学討論会、大阪大学 大阪大学会館、大阪府豊中市、2015 年 5 月 20-22 日
51. 長尾一哲・大宮寛久・澤村正也(北大院理)、“ホスフィン有機分子触媒によるアルキノエ

- ートのアンチ選択的カルボホウ素化、シリルホウ素化およびジホウ素化反応”、第 107 回有機合成シンポジウム 2015 年【春】、慶応義塾大学薬学部マルチメディア講堂、東京都港区、2015 年 6 月 9-10 日
52. 山崎馨・高木牧人・原渕祐・前田理・武次徹也（北大院理），“プロトン付加フェニルアミン・セリン二量体の非断熱項間交差経路”，化学反応経路探索のニューフロンティア 2015，品川区立総合区民会館，東京都品川区，2015 年 9 月 15 日
53. 岩井智弘・原田友哉・島田肇・澤村正也（北大院理），“ポリスチレン四点架橋ビスホスフィンの配位子効果に基づくニッケル触媒クロスカップリング反応”，第 116 回触媒討論会，三重大学，三重県津市，2015 年 9 月 16-18 日
54. 山崎馨・高木牧人・原渕祐・前田理・武次徹也（北大院理），“プロトン付加フェニルアミン・セリン 2 量体の構造と水素結合ネットワークの影響”，第 9 回分子科学討論会，東京工業大学，東京都目黒区，2015 年 9 月 16-19 日
55. 住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“時間発展を考慮した反応経路自動探索”，第 9 回分子科学討論会，東京工業大学，東京都目黒区，2015 年 9 月 16-19 日
56. 小林正人・黒田悠介・秋葉欣哉・武次徹也（北大院理），“Sb および Te 化合物のリガンド交換・リガンドカップリング反応メカニズム”，日本コンピュータ化学会 2015 年秋季年会，函館市地域交流まちづくりセンター，北海道函館市，2015 年 10 月 30-31 日
57. 岩佐豪・竹中将斗・武次徹也（北大院理），“任意の電場を考慮した赤外吸収分光の理論計算手法の開発”，第 63 回応用物理学会春季学術講演会，東京工業大学，東京都目黒区，2016 年 3 月 19-22 日
58. 北條健太郎・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“銅触媒によるアルキルボランのエナンチオ選択的分子内アリル化”，日本化学会第 96 春季年会，同志社大学，京都府京田辺市，2016 年 3 月 24-27 日
59. 島田肇・原田友哉・岩井智弘・澤村正也（北大院理），“第一級アルキルアミンによる塩化アリール類のニッケル触媒アミノ化反応：ビスホスフィン分岐ポリスチレンの効果”，日本化学会第 96 春季年会，同志社大学，京都府京田辺市，2016 年 3 月 24-27 日
60. 村山大明・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“ホスフィン触媒によるアルキノエートのアシルシアノ化反応”，日本化学会第 96 春季年会，同志社大学，京都府京田辺市，2016 年 3 月 24-27 日
61. 安田優人・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“アリルホウ酸エステルと第 1 級リン酸アリルのエナンチオ選択的銅触媒アリル-アリルカップリング”，日本化学会第 96 春季年会，同志社大学，京都府京田辺市，2016 年 3 月 24-27 日
62. 上野将寛・大河内妃織・岩井智弘・澤村正也（北大院理），“半中空トリエチニルホスフィン-金触媒を用いた 1,9-エンイン類の環化異性化反応による八員環形成”，日本化学会第 96 春季年会，同志社大学，京都府京田辺市，2016 年 3 月 24-27 日
63. 柴田沙織・原田安祐・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“末端アルキンのエナンチオ選択的銅触媒アリル化による第四級不斉炭素中心の構築”，日本化学会第 96 春季年会，同志社大学，京都府京田辺市，2016 年 3 月 24-27 日
64. 森永晶・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“末端アルキンとビス（ピナコラート）ジボロンのブレンステッド塩基触媒反応による 1,1-ジブリアルケンの合成”，日本化学会第 96 春季年会，同志社大学，京都府京田辺市，2016 年 3 月 24-27 日
65. 山崎絢香・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“ホスフィン触媒と有機ホウ素反応剤によるアルキンのアンチ-カルボホウ素化反応：アルキン基質の拡張”，日本化学会第 96 春季年会，同志社大学，京都府京田辺市，2016 年 3 月 24-27 日
66. 原渕祐・山本梨奈・斉田謙一郎・前田理・武次徹也（北大院理），“光反応の反応経路自動探索：内部転換・項間交差・蛍光・りん光過程の包括的解析に向けて”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
67. 高木牧人・前田理・武次徹也（北大院理），“人工力誘起反応 (AFIR) 法の周期系への拡張：炭素の結晶構造探索への適用”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
68. 斉田謙一郎・原渕祐・武次徹也・石谷治・前田理（北大院理），“トリカルボニルジイミン Re(I) 錯体における項間交差と光反応性”，第 28 回配位化合物の光化学討論会，京都工芸

- 繊維大学 松ヶ崎キャンパス, 京都府京都市, 2016年8月8-10日
69. 小林正人・武次徹也(北大院理), “分割統治 Hartree-Fock-Bogoliubov 法による大規模系の静的電子相関計算”, 第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマート, 兵庫県神戸市, 2016年9月13-15日
 70. 高敏・Ben Wang・足立将・Andrey Lyalin・武次徹也(北大院理), “炭素ドーブによる h-BN 表面活性領域拡大に関する理論的研究”, 第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマート, 兵庫県神戸市, 2016年9月13-15日
 71. 齊田謙一郎・岡田治樹・原渕祐・前田理・武次徹也(北大院理), “分子性結晶における項間交差経路の系統的探索: リン光能および光触媒能への理論的アプローチ”, 第10回分子科学討論会, 神戸ファッションマート, 兵庫県神戸市, 2016年9月13-15日
 72. 岩井智弘・原田友哉・島田肇・浅野輝一・澤村正也(北大院理), “ポリスチレン架橋ビスホスフィンの配位特性に基づく高活性第一遷移系列金属触媒の創製”, 第63回有機金属化学討論会, 早稲田大学 西早稲田キャンパス, 東京都新宿区, 2016年9月14-16日
 73. 小林正人・岩佐豪・高敏・高木牧人・前田理・武次徹也(北大院理), “第39回ケモインフォマティクス討論会”, 静岡大学浜松キャンパス, 静岡県浜松市, 2016年9月29-30日
 74. 岩井智弘・田中遼太郎・澤村正也(北大院理), “トリアリールメタン-モノホスフィン: 合成、配位特性およびPd触媒共役付加反応への適用”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 75. Tomohiro Iwai, Tomoya Harada, Hajime Shimada, Kiichi Asano, Deliang zhang, Shigenori Chiba, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “A Phosphine Cross-Linked Method for Producing Highly Active Heterogeneous Transition Metal Catalysts”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 76. 原田 友哉・岩井 智弘・澤村 正也(北大院理), “ニッケル触媒によるフッ化アリールと第一級アミンのクロスカップリング反応”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 77. Ryo Murakami, Tomohiro Iwai, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Palladium-Catalyzed Enantioselective Side Chain C(α) Allylation of 2-Alkylazaarenes”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 78. 北條健太郎・大宮寛久・澤村正也(北大院理), “イソシアニド/ヒドロシラン/アリル求電子剤の不斉銅触媒3成分カップリングによる α -第4級ホルムイミド/アルデヒドの合成”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 79. 小西菫太・岩井智弘・澤村正也(北大院理), “ボレート含有かご型トリアリールホスフィンの合成と配位特性”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 80. 山崎絢香・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也(北大院理), “ホスフィン触媒と1,1-ジボリルアルカン反応剤によるアルキノエートのアンチ-カルボホウ素化反応: γ -ホウ素置換アリルボランの合成”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 81. 上野雅人・北條健太郎・大宮寛久・澤村正也(北大院理), “イソシアニド/ヒドロシラン/ハロゲン化アルキルのニッケル触媒三成分カップリングによるホルムイミド/アルデヒドの合成”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 82. 鳶巢守・西澤彰宏・高比良剛・岩井智弘・澤村正也・茶谷直人(阪大院工・北大院理), “ニッケル触媒とポリスチレン架橋ビスホスフィン配位子を用いる芳香族カルバメートの脱炭酸アミノ化反応”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.
 83. 齋藤崇伸・鷹谷絢・浅野輝一・千葉成倫・岩井智弘・澤村正也・岩澤伸治(東工大院理・北大院理), “ポリマー架橋型ビスホスフィン配位子を用いた単純芳香族化合物のC-H結合カルボキシル化反応の開発”, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学 日吉キャンパス, 神奈川県横浜市, 2017年3月16-19日.

84. 住谷陽輔・武次徹也・前田理（北大院理），“速度定数行列縮約法を用いた反応経路自動探索の効率化：多成分連結反応への応用”，日本化学会第 97 春季年会，慶應義塾大学 日吉キャンパス，神奈川県横浜市，2017 年 3 月 16-19 日。
85. 三瓶匡史・住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“塩化アルミニウムを用いる Friedel-Crafts アルキル化反応の触媒機構及び速度論に関する理論的研究”，日本化学会第 97 春季年会，慶應義塾大学 日吉キャンパス，神奈川県横浜市，2017 年 3 月 16-19 日。
86. 杉山佳奈美・高木牧人・斉田謙一郎・前田理・武次徹也（北大院理），“Pt(111) 表面による CO 酸化に対する反応経路ネットワークとその解析”，日本化学会第 97 春季年会，慶應義塾大学 日吉キャンパス，神奈川県横浜市，2017 年 3 月 16-19 日。
87. Martin C Schwarzer, Takaoki Ishii, Hirohisa Ohmiya, Masaya Sawamura, and Seiji Mori (Ibaraki University, Hokkaido University), “Experimental and computational investigations on the enantioselective alkynylation of α -ketosesters via copper catalysis”, 日本化学会第 97 春季年会，慶應義塾大学 日吉キャンパス，神奈川県横浜市，2017 年 3 月 16-19 日。
88. 吉村誠慶・前田理・澤村正也・武次徹也・諸熊奎治・森聖治（茨城大理・北大院理），“Rh(I)-BINAP 触媒によるアリルアミンの異性化経路の探索とグラフを用いた経路最適化”，第 20 回理論化学討論会，京都大学（吉田キャンパス）時計台国際交流ホール，京都府京都市，2017 年 5 月 16-18 日。
89. 住谷陽輔・前田理（北大院理），“多成分連結反応の反応経路ネットワークとその速度論的理解：パッセリーニ反応”，第 20 回理論化学討論会，京都大学（吉田キャンパス）時計台国際交流ホール，京都府京都市，2017 年 5 月 16-18 日。
90. 今井洗児・高山ゆりえ・石井孝興・大宮寛久・岩井智弘・Schwarzer Martin・佐藤丈弘・森聖治・澤村正也（茨城大理・北大院理），“銅触媒不斉アルキン-ニトロカップリングによる β -ラクタムの不斉合成”，第 47 回複素環化学討論会，高知県立県民文化ホール，高知県香美市，2017 年 10 月 26-28 日
91. Ronald, L. Reyes, Tomoya Harada, Tomohiro Iwai, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Rhodium- or Iridium-Catalyzed Enantioselective C(sp³)-H Borylation with Chiral Monophosphine Ligands”, 日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
(前述「(1)原著論文発表」において取り下げられた論文 No. 133 に関連する発表のため、成果から除外いたします)
92. Yuto Yasuda, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Development of Asymmetric Copper Catalysis with Phenol-NHC Chiral Ligands: A Case of Allylic Coupling with Organoboron Reagents”, 日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
93. 今井洗児・高山ゆりえ・村山大明・澤村正也（北大院理），“キラルプロリノール-ホスフィン-銅触媒による α -メチレン- β -ラクタムの不斉合成”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
94. Deliang Zhang, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Transfer Hydrogenation of Alkenes Using 1,4-Dioxane as a Hydrogen Source Catalyzed by a Polystyrene-Cross-Linking Bisphosphine-Iridium Complex”, 日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
95. 有馬望・岩井智弘・澤村正也（北大院理），“ポリスチレン架橋ビスホスフィン-ニッケル触媒による有機リチウム化合物のクロスカップリング”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
96. 村山大明・澤村正也（北大院理），“キラルプロリノール-ホスフィン-イリジウム触媒によるケトンの水素移動型不斉還元”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
97. 三村祥平・安田優人・澤村正也（北大院理），“フェノール-NHC キラル配位子を用いた銅触媒不斉ヒドロシラン還元反応”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
98. 藤岡茜・Schwarzer C. Martin・石井孝興・大宮寛久・森聖治・澤村正也（茨城大理・北大院理），“キラルプロリノール-ホスフィン-銅触媒を用いた末端アルキンによる α -ケト

- エステルの不斉直接アルキニル化”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
99. 荒島純弥・岩井智弘・澤村正也（北大院理），“ポリスチレン架橋トリアルキルホスフィンの合成とパラジウム触媒クロスカップリングへの応用”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
100. 鳶巢守・西澤彰宏・岩井智弘・澤村正也・茶谷直人（阪大院工・北大院理），“芳香族カルバメートの脱炭酸アミノ化反応の開発とその機構研究”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
101. 原渕祐・前田理（北大院理），“時間依存密度汎関数理論に基づく円錐交差自動探索法の開発と応用”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
102. 川島恭平・笹野裕介・小暮直貴・笠畑洸希・岩渕好治・森聖治（茨城大理），“不斉配位子複合型ニトロキシラジカル/銅協奏触媒を用いるラセミ第 2 級アルコールの酸化的速度論的光学分割に関する理論的研究”，日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日
103. OSHITA, Hiromi; YOSHIMURA, Takayoshi; ABE, Hitoshi; TANI, Fumito; MORI, Seiji; SHIMAZAKI, Yuichi (Ibaraki University), “The electronic structure of one-electron oxidized Ni, Cu-salen complexes containing a side chain indole ring”, 日本化学会第 98 春季年会，日本大学船橋キャンパス，千葉県船橋市，2018 年 3 月 20-23 日

<国際会議>

1. Andrey Lyalin, Akira Nakayama, Kohei Uosaki, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Catalytic activity of h-BN based nanomaterials for oxygen reduction reaction”, The Sixteenth International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHC-16), Hokkaido University, Sapporo, Japan, Aug. 8-9, 2013.
2. Seiji Mori (Ibaraki University), “Computational Studies on Metal-mediated C-C and C-H Bond Cleavage Reactions in Organometallic/Bioinorganic Chemistry”, The 19th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP-XIX), Tamsui, Taipei, Taiwan, Nov. 11-17, 2014.
3. Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “A theoretical study on correlations between fluorescence quantum yield and the lowest minimum energy conical intersection”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
4. Makito Takagi, Min Gao, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Toward theoretical prediction of reactivity of small metal clusters: H-H bond activation by small Au-Ag alloy clusters”, The 11st Hokkaido Univ.-Nanjing Univ. Joint symposium: 2015 HU-NU-NIMS/MANA Joint symposium, Nanjing, China, Oct. 16-18, 2015.
5. Takuya Ishitsuka, Yasuhiro Okuda, Robert K. Szilagy, Yasushi Nishihara, Seiji Mori (Ibaraki University), “Theoretical Studies on Palladium-Catalyzed exo-Selective Cyanoesterification of Methyl Cyanofornate onto Norbornene”, The 11th International Student Conference at Ibaraki University (ISCIU 11), Ibaraki University, Mito, Japan, Dec. 5-6, 2015.
6. Tomohiro Iwai, Masahiro Ueno, Hiori Okochi, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Construction of Medium-sized Rings through Gold(I)-catalyzed Alkyne Cyclizations with Hollow-shaped Phosphine Ligands”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15-20, 2015.
7. Tetsuya Taketsugu, Andrey Lyalin, Akira Nakayama, Ganesan Elumalai, Hidenori Noguchi, Takuya Masuda, and Kohei Uosaki (Hokkaido University), “Theoretical investigation of catalytic activity of BN-based nanomaterials for ORR and interplay with experiment”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15-20, 2015.
8. Andrey Lyalin, Ken-ichi Shimizu, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study of the dehydrogenation of isopropanol on Ni₁₃ cluster supported on Θ -Al₂O₃ surface”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15-20, 2015.
9. Takeshi Iwasa and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical methods for infrared absorption spectroscopy with nonuniform electric fields”, 2015 International Chemical Congress of

Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.

- Masato Kobayashi and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Toward large-scale quantum chemical calculations with static and dynamical electron correlations”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.
- Masato Kobayashi and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “MP2 theory at finite temperature: Relation with density matrix MP2 and its application to divide-and-conquer method”, the Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), Kaohsiung, Taiwan, Jan. 25–28, 2016.
- Kenichiro Saita, Yu Harabuchi, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of fac-[Re(bpy)(CO)₃(PR₃)⁺ complex”, 32nd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Sonic City Hall, Saitama, Japan, Jun. 1–3, 2016.
- Yosuke Sumiya, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Conformational entropy in Claisen rearrangement studied by a new kinetic approach”, International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016, Borneo Convention Center, Kuching, Malaysia, Aug. 15–18, 2016.
- Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Catalysis with Polystyrene-Cross-Link Phosphine Ligands”, 2nd International Symposium on Precisely Designed Catalysts with Customized Scaffolding, Osaka University, Osaka, Japan, May 12-13, 2017.
- Makito Takagi, Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Crystal structure prediction by Artificial Force Induced Reaction method: A case study on carbon crystal”, International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) 2018, Siem Reap, Cambodia, Mar. 7-10, 2018.

③ ポスター発表 (国内会議 109 件、国際会議 95 件→94 件に修正)

(国際会議 No. 90 の発表については、前述「(1) 原著論文発表」において取り下げられた論文 No. 133 に関連する発表のため、件数を修正するものです)

<国内会議>

- 小池千明・前田理・武次徹也 (北大院理)、“反応経路自動探索法によるオレフィンメタセシス反応経路の配位子依存性の検討”、第 16 回理論化学討論会、福岡市健康づくりサポートセンター、福岡市、2013 年 5 月 15-17 日
- 長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“銅触媒によるアルキルホウ素化合物のリン酸アリル類の立体選択的カップリング反応”、第 23 回万有福岡シンポジウム、九州大学医学部百年講堂、福岡市、2013 年 6 月 1 日
- 大河内妃織・岩井智弘・澤村正也 (北大院理)、“半中空トリエチニルホスフィンの配位子効果に基づくアルキン連結シリルエノールエーテルの金触媒 8-エキソ環化反応”、第 25 回万有札幌シンポジウム、北海道大学工学部オープンホール、札幌市、2013 年 7 月 5 日
- 北條健太郎・志度義教・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“アルキルボランと塩化アリル類のエナント選択的銅触媒クロスカップリングによる第四級不斉炭素中心の構築”、第 60 回有機金属化学討論会、学習院大学学習院創立百年記念会館、東京都豊島区、2013 年 9 月 12-14 日
- 若松鷹道・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理)、“銅触媒によるアルキルボラン／アルキノエート／スズアルコキシドの三成分カップリングを用いた三置換ビニルスズ化合物の合成”、第 60 回有機金属化学討論会、学習院大学学習院創立百年記念会館、東京都豊島区、2013 年 9 月 12-14 日
- Min Gao, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Masaya Sawamura (北大院理)、“Theoretical study on the mechanism of Ir catalyzed site-selective borylation of a C (sp³)-H bond in 2-alkylpyridines”, 第 7 回分子科学討論会、京都テルサ、京都市、2013 年 9 月 24-27 日
- 小池千明・前田理・武次徹也・澤村正也 (北大院理)、“GRRM/AFIR 法によるキラルフェロセニルホスフィン-Au(I) 錯体によるイソシアノ酢酸エステル不斉アルドール反応機構の理論的説明”、第 7 回分子科学討論会、京都テルサ、京都市、2013 年 9 月 24-27 日
- 植松遼平・前田理・武次徹也 (北大院理)、“GRRM/AFIR 法による 2-トリメチルシロキシボランを用いる vinylogous Mannich-type 反応の機構的説明: 速度論的支配 vs. 熱力学的支配”、第 7 回分子科学討論会、京都テルサ、京都市、2013 年 9 月 24-27 日

9. 植松遼平・前田理・武次徹也 (北大院理), "GRRM/AFIR 法による 2-トリメチルシロキシフuranを用いる vinylogous Mannich-type 反応の機構解明: 速度論的支配 vs. 熱力学的支配 "、シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2013」、京都大学福井謙一記念研究センター、京都市、2013年9月27日
10. 小池千明・前田理・武次徹也・澤村正也 (北大院理), "GRRM/AFIR 法によるキラルフェロセニルホスフィン-Au(I)錯体によるイソシアノ酢酸エステル不斉アルドール反応機構の理論解明"、シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2013」、京都大学福井謙一記念研究センター、京都市、2013年9月27日
11. Min Gao, Satoshi Maeda, Andrey Lyalin, and Tetsuya Taketsugu (北大院理), "Automated prediction of single bond activation pathways on small metal clusters: A case study of H₂ dissociation on Au_n (n=1-10)", シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2013」、京都大学福井謙一記念研究センター、京都市、2013年9月27日
12. 岩井智弘・村上遼・原田友哉・澤村正也 (北大院理), "遷移金属触媒によるピリジン側鎖アルキル基の位置選択的 C(sp³)-H ホウ素化反応: 固相担持ホスフィン配位子の効果"、第43回複素環化学討論会、長良川国際会議場、岐阜市、2013年10月17-19日
13. 小西菖太・川守田創一郎・岩井智弘・Patrick G. Steel・Todd B. Marder・澤村正也 (北大院理), "キノリン類の8位選択的 C-H ホウ素化反応: シリカ担持ホスフィン-Ir 触媒の適用"、第43回複素環化学討論会、長良川国際会議場、岐阜市、2013年10月17-19日
14. 村上遼・岩井智弘・澤村正也 (北大院理), "含ケイ素かご型モノホスフィンのシリカ直接担持に基づく Ir 触媒 C(sp³)-H 直接ホウ素化反応の開発"、第17回ケイ素化学協会シンポジウム、箱根湯本温泉ホテルおかだ、神奈川県足柄下郡、2013年10月25-26日
15. 田中遼太郎・岩井智弘・澤村正也 (北大院理), "シリカ三脚担持ホスフィンによる P モノ配位 Pd 錯体の選択的形成とクロスカップリング反応への応用"、第17回ケイ素化学協会シンポジウム、箱根湯本温泉ホテルおかだ、神奈川県足柄下郡、2013年10月25-26日
16. 吉村 誠慶・前田 理・澤村 正也・諸熊 奎治・森 聖治 (茨城大理), "Rh(I)-BINAP 触媒によるアリルアミンの1,3-不斉水素転位反応に関する理論的研究"、錯体化学会第63回討論会、琉球大学千原キャンパス、沖縄県中頭郡、2013年11月2-4日
17. 原田友哉・島田肇・岩井智弘・澤村正也 (北大院理), "ポリスチレン三点架橋ホスフィンによる遷移金属錯体触媒の反応場制御"、第26回 万有札幌シンポジウム、北海道大学 工学部オープンホール、北海道札幌市、2014年7月5日
18. 長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理), "有機ボランによるアルキノエートのホスフィン触媒カルボホウ素化反応"、第61回有機金属化学討論会、九州大学医学部 百年講堂、福岡県福岡市、2014年9月23-25日
19. 村上遼・角田圭・岩井智弘・澤村正也 (北大院理), "シリカ担持モノホスフィン-イリジウム触媒によるシクロプロパンおよびシクロブタン類の立体選択的 C-H ホウ素化反応"、第61回有機金属化学討論会、九州大学医学部 百年講堂、福岡県福岡市、2014年9月23-25日
20. 安田優人・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理), "第2級アルキルボランとリン酸アリルのγ位選択的立体特異的銅触媒クロスカップリング反応"、第61回有機金属化学討論会、九州大学医学部 百年講堂、福岡県福岡市、2014年9月23-25日
21. 植松遼平・山本英治・前田理・伊藤肇・武次徹也 (北大院理), "人工力誘起反応法による有機ハロゲン化物とシリルボラン/アルコキシ塩基系の機構解析"、第61回有機金属化学討論会、九州大学医学部 百年講堂、福岡県福岡市、2014年9月23-25日
22. 藤川宗志・植松遼平・前田理・武次徹也 (北大院理), "GRRM/AFIR 法による水分子を鍵とする Vinylogous-Mannich 型反応の立体選択性解析"、第8回分子科学討論会 2014、広島大学東広島キャンパス、広島県東広島市、2014年9月21-24日
23. 北條健太郎・志渡義教・大宮寛久・澤村正也 (北大院理), "アルキルボランと第1級塩化アリル類のエナンチオ選択的銅触媒カップリングによる第四級不斉炭素中心の構築"、第4回 CSJ 化学フェスタ 2014、タワーホール船橋、東京都江戸川区、2014年10月14-16日
24. 安田優人・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理), "第2級アルキルボランとリン酸アリルのγ位選択的立体特異的銅触媒カップリング反応"、第4回 CSJ 化学フェスタ 2014、タワーホール船橋、東京都江戸川区、2014年10月14-16日
25. 村山大明・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也 (北大院理), "銅(I)触媒を用いた末端アルケ

- ンの分子内ヒドロアルコキシ化反応”、第4回CSJ化学フェスタ2014、タワーホール船橋、東京都江戸川区、2014年10月14-16日
26. 吉村誠慶・前田理・澤村正也・武次徹也・諸熊奎治・森聖治(茨城大理)、“Rh(I)-BINAP 触媒によるアリルアミンの1,3-不斉水素転移反応に関する理論的研究”、日本コンピューター化学会2014秋季年会、日本大学工学部、福島県郡山市、2014年10月18-19日
 27. 黒田悠介・小林正人・秋葉欣哉・武次徹也(北大院理)、“5配位超原子価Sb化合物のリガンドカップリング反応に関する理論的研究”、第41回有機典型元素化学討論会、宇部市文化会館、山口県宇部市、2014年11月27-29日
 28. 原渕祐・武次徹也・前田理(北大院理)、“Franck-Condon 領域近傍の最小エネルギー円錐交差・項間交差構造の系統的自動探索：蛍光量子収率の予測へ向けて”、第18回理論化学討論会、大阪大学 大阪大学会館、大阪府豊中市、2015年5月20-22日
 29. 高木牧人・前田理・武次徹也(北大院理)、“AFIR法と周期境界条件を用いた結晶構造探索”、第18回理論化学討論会、大阪大学 大阪大学会館、大阪府豊中市、2015年5月20-22日
 30. 村山大明・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也(北大院理)、“銅(I)触媒による分子内アルケンヒドロアルコキシ化反応”、第27回万有札幌シンポジウム、北海道大学、北海道札幌市、2015年7月4日
 31. 岩井智弘・原田友哉・島田肇・澤村正也(北大院理)、“ポリスチレン四点架橋ビスホスフィンの開発とニッケル触媒クロスカップリング反応への応用”、第62回有機金属化学討論会、関西大学、大阪府吹田市、2015年9月5-7日
 32. 森永晶・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也(北大院理)、“ジボロンと末端アルキンのブレンステッド塩基触媒反応による1,1-ジボリルアルケンの合成”、第62回有機金属化学討論会、関西大学、大阪府吹田市、2015年9月5-7日
 33. 張恒・原田安祐美・大宮寛久・澤村正也(北大院理)、“ヘテロアレーンのエナンチオ選択的銅触媒C-Hアリル化による第四級不斉炭素中心の構築”、第62回有機金属化学討論会、関西大学、大阪府吹田市、2015年9月5-7日
 34. 曾桂香・前田理・武次徹也・大宮寛久・澤村正也(北大院理)、“銅触媒による末端アルキンのアリル位アルキン化反応に関する理論的研究：反応機構と位置及び立体選択性起源の解明”、第62回有機金属化学討論会、関西大学、大阪府吹田市、2015年9月5-7日
 35. 北條健太郎・志渡義教・大宮寛久・澤村正也(北大院理)、“アルキルボランと第一級塩化アリル類のエナンチオ選択的銅触媒クロスカップリング反応”、第32回有機合成化学セミナー、ニューウェルシティ湯河原、静岡県熱海市、2015年9月15-17日
 36. 小西菖太・岩井智弘・宮崎辰也・川守田創一郎・横川夏海・大宮寛久・澤村正也(北大院理)、“シリカ担持かご型トリアリールホスフィン配位子Silica-TRIPの合成・性質・触媒反応への利用”、第32回有機合成化学セミナー、ニューウェルシティ湯河原、静岡県熱海市、2015年9月15-17日
 37. 原渕祐・齊田謙一郎・前田理・武次徹也(北大院理)、“最小エネルギー円錐交差・項間交差構造の系統的自動探索：蛍光量子収率に対する理論的アプローチ”、化学反応経路探索のニューフロンティア2015、品川区立総合区民会館、東京都品川区、2015年9月15日
 38. 齊田謙一郎・原渕祐・前田理・武次徹也(北大院理)、“レニウム(I)ビピリジルトリカルボニル錯体の光反応性”、化学反応経路探索のニューフロンティア2015、品川区立総合区民会館、東京都品川区、2015年9月15日
 39. 市野智也・前田理・武次徹也(北大院理)、“グリシン水和クラスターの光イオン化過程に関する反応経路自動探索”、化学反応経路探索のニューフロンティア2015、品川区立総合区民会館、東京都品川区、2015年9月15日
 40. 住谷陽輔・前田理・武次徹也(北大院理)、“速度論に基づく複雑反応経路網の解析と自動探索との連携”、化学反応経路探索のニューフロンティア2015、品川区立総合区民会館、東京都品川区、2015年9月15日
 41. 高木牧・前田理・武次徹也(北大院理)、“AFIR法による表面反応経路探索:Au表面上のCO酸化反応への適用”、化学反応経路探索のニューフロンティア2015、品川区立総合区民会館、東京都品川区、2015年9月15日
 42. 坂智尋・植松遼平・住谷陽輔・前田理・武次徹也(北大院理)、“AFIR法によるトリエチルボラン/酸素系のラジカル発生機構の解明と活性種の速度論解析”、化学反応経路探索のニュー

- ーフロンティア 2015, 品川区立総合区民会館, 東京都品川区, 2015年9月15日
43. 佐藤壮太・原渕祐・飯窪亮・藤原丈久・関川太郎・武次徹也 (北大院理), “AIMD 計算による 1,2-ブタジエン光励起失活過程の理論的研究”, 化学反応経路探索のニューフロンティア 2015, 品川区立総合区民会館, 東京都品川区, 2015年9月15日
 44. 山本梨奈・原渕祐・武次徹也 (北大院理), “AIMD 計算によるジメチルスチルベンの光励起分岐反応機構に関する理論的研究”, 化学反応経路探索のニューフロンティア 2015, 品川区立総合区民会館, 東京都品川区, 2015年9月15日
 45. 小林正人・黒田悠介・秋葉欣哉・武次徹也 (北大院理), “5 配位 Sb 化合物のリガンドカップリング反応経路”, 化学反応経路探索のニューフロンティア 2015, 品川区立総合区民会館, 東京都品川区, 2015年9月15日
 46. 原渕祐・斉田謙一郎・前田理・武次徹也 (北大院理), “蛍光・リン光量子収率に対する理論的アプローチ: 多環芳香族炭化水素への応用”, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2015年9月16-19日
 47. 斉田謙一郎・原渕祐・前田理・武次徹也 (北大院理), “ホスフィン配位子を有するレニウム錯体における光誘起配位子交換反応機構の理論的研究”, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2015年9月16-19日
 48. 市野智也・前田理・武次徹也 (北大院理), “グリシン水和クラスターの光イオン化過程に関する反応経路自動探索: 水分子の役割”, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2015年9月16-19日
 49. 高木牧・前田理・武次徹也 (北大院理), “人工力誘起反応法による表面化学反応の経路探索: Au 表面による CO 酸化反応への適用”, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2015年9月16-19日
 50. 坂智尋・植松遼平・住谷陽輔・前田理・武次徹也 (北大院理), “トリエチルボラン/酸素系のラジカル発生機構: 反応経路探索と速度論解析による活性種の予測”, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2015年9月16-19日
 51. 佐藤壮太・原渕祐・飯窪亮・藤原丈久・関川太郎・武次徹也 (北大院理), “1,2-ブタジエンの超高速失活過程に関する理論的研究”, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2015年9月16-19日
 52. 山本梨奈・原渕祐・武次徹也 (北大院理), “スチルベンの光異性化反応ダイナミクスへの置換基効果に関する理論的研究”, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2015年9月16-19日
 53. 小林正人・福田幸太郎・中野雅由・武次徹也 (北大院理), “ジェミナル理論および HFB 法を用いたジラジカル性分子の非線形光学応答計算”, 第9回分子科学討論会, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2015年9月16-19日
 54. 今野遼佑・大舩彰道・安留綾香・北條貴之・高橋弘旭・鳶巢守・茶谷直人・森 聖治 (茨城大理・阪大院工), “Ni 触媒によるメトキシアレーンとフェニルボロン酸エステルのクロスカップリング反応に関する理論的研究”, 第26回日本化学会関東支部茨城地区研究交流会, 日立市多賀市民プラザ, 茨城県日立市, 2015年11月27日
 55. 森田啓嗣・高木牧人・前田理・武次徹也 (北大院理), “反応経路自動探索法を用いた金属クラスターの NO 還元能評価法の検討”, 化学系学協会北海道支部 2016年冬季研究発表会, 北海道大学フロンティア応用科学研究棟, 北海道札幌市, 2016年1月19-20日
 56. 藤森俊和・小林正人・武次徹也 (北大院理), “分割統治 (DC) 法による大規模近似量子化学計算: 誤差の制御手法開発”, 化学系学協会北海道支部 2016年冬季研究発表会, 北海道大学フロンティア応用科学研究棟, 北海道札幌市, 2016年1月19-20日
 57. 三瓶匡史・前田理・武次徹也 (北大院理), “Friedel-Crafts アルキル化反応の系統的理論研究: 反応設計指針の抽出を目指して”, 化学系学協会北海道支部 2016年冬季研究発表会, 北海道大学フロンティア応用科学研究棟, 北海道札幌市, 2016年1月19-20日
 58. 竹中将斗・岩佐豪・武次徹也 (北大院理), “電場計算を取り入れた赤外吸収スペクトルの計算手法開発”, 化学系学協会北海道支部 2016年冬季研究発表会, 北海道大学フロンティア応用科学研究棟, 北海道札幌市, 2016年1月19-20日
 59. 松田光希・森田啓嗣・前田理・武次徹也 (北大院理), “超配位構造の自動探索”, 第19回理論化学討論会, 早稲田大学 西早稲田キャンパス, 東京都新宿区, 2016年5月23-25日

60. 小林正人・武次徹也（北大院理），“多成分系の量子化学計算解析のための XML スキーマの検討”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
61. 岩佐豪・佐藤貴暁・高敏・Andrey Lyalin・小林正人・前田理・武次徹也（北大院理），“Cu₁₃ クラスターの構造異性体と NO 吸着解離反応触媒活性”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
62. 高敏・Ben Wang・足立将・Andrey Lyalin・武次徹也（北大院理），“Long range functionalization of h-BN monolayer by carbon doping”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
63. 斉田謙一郎・原渕祐・前田理・武次徹也（北大院理），“レニウム (I) ビピリジルトリカルボニル錯体の光反応性と項間交差”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
64. 曾桂香・前田理・武次徹也・榊茂好（北大院理・京大福井謙一記念研究センター），“Theoretical Study on Cooperative Catalysis of Constrained Pincer-type Phosphorus Compound: Mechanism, Electronic Process and Prediction”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
65. 市野智也・武次徹也・前田理・大村智通・杉野目道紀（北大院理・京大院工），“有機分子触媒によるピラジン誘導体ジホウ素化の反応機構に関する理論的研究”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
66. 住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“複雑反応経路網上で起こる単分子解離反応の分岐比の厳密解”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
67. 三瓶匡史・住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“Friedel-Crafts アルキル化反応の選択性に関する速度論的研究”，第 19 回理論化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 5 月 23-25 日
68. 安田優人・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“アリルホウ酸エステルとリン酸アリルによる銅触媒エナンチオ選択的アリル-アリルカップリング反応”，第 28 回万有札幌シンポジウム，北海道大学，北海道札幌市，2016 年 7 月 1 日
69. 原渕祐・斉田謙一郎・前田理・武次徹也（北大院理），“内部転換・項間交差経路の系統的自動探索：蛍光・りん光強度の予測に向けて”，第 28 回配位化合物の光化学討論会，京都工芸繊維大学 松ヶ崎キャンパス，京都府京都市，2016 年 8 月 8-10 日
70. 原田友哉・岩井智弘・島田肇・浅野輝一・澤村正也（北大院理），“ポリスチレン架橋ビスホスフィン：第一周期遷移金属触媒における顕著なポリマー効果”，第 33 回有機合成化学セミナー，ヒルトンニセコビレッジ，北海道ニセコ町，2016 年 9 月 6-8 日
71. 柴田沙織・原田安祐美・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“ナフトール-NHC 複合型キラル配位子を用いた末端アルキンの銅触媒アリル位アルキル化による全炭素置換第四級不斉中心の構築”，第 33 回有機合成化学セミナー，ヒルトンニセコビレッジ，北海道ニセコ町，2016 年 9 月 6-8 日
72. 山崎絢香・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“ホスフィン触媒と 1,1-ジボリルアルカン反応剤によるアルキノエートのアンチ-カルボホウ素化反応：γ-ボリル置換アリルボラン誘導体の合成”，第 33 回有機合成化学セミナー，ヒルトンニセコビレッジ，北海道ニセコ町，2016 年 9 月 6-8 日
73. 高敏・武次徹也・前田理・澤村正也（北大院理），“A theoretical study on the cavity effect of semi-hollow-ligand on Gold(I)-catalyzed alkyne cyclization”，第 33 回有機合成化学セミナー，ヒルトンニセコビレッジ，北海道ニセコ町，2016 年 9 月 6-8 日
74. Guixiang Zeng, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Theoretical Study on Copper-Catalyzed Allylic Alkylation of Terminal Alkynes: Mechanism, Origins of Regio- and Enantioselectivity”, 第 33 回有機合成化学セミナー，ヒルトンニセコビレッジ，北海道ニセコ町，2016 年 9 月 6-8 日
75. 曾桂香・前田理・武次徹也・榊茂好（北大院理・京大福井謙一記念研究センター），“ペンサー型リン化合物の協同触媒効果に関する理論的研究：反応機構、電子的過程、および、新触媒の予測”，第 27 回基礎有機化学討論会，広島国際会議場，広島県広島市，2016 年 9

月 1-3 日

76. 齊田謙一郎・岡田治樹・高木牧人・原渕祐・前田理・武次徹也（北大院理），“結晶中における分子の発光能と項間交差経路探索”，化学反応経路探索のニューフロンティア 2016，京都教育文化センター，京都府京都市，2016 年 9 月 12 日
77. 市野智也・前田理・武次徹也（北大院理），“ $[\text{Rh}_6(\text{NO})_n]_m^+$ ($n = 0-7$), ($m = 0, 1$) クラスターの構造と反応性に関する理論的研究”，化学反応経路探索のニューフロンティア 2016，京都教育文化センター，京都府京都市，2016 年 9 月 12 日
78. 住谷陽輔・武次徹也・前田理（北大院理），“単分子解離反応の分岐比を算出する速度定数行列完全縮約法の開発”，化学反応経路探索のニューフロンティア 2016，京都教育文化センター，京都府京都市，2016 年 9 月 12 日
79. 高木牧人・前田理・武次徹也（北大院理），“AFIR 法を用いた結晶構造探索：炭素の結晶構造探索への適用”，化学反応経路探索のニューフロンティア 2016，京都教育文化センター，京都府京都市，2016 年 9 月 12 日
80. 三瓶匡史・住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“塩化アルミニウムを用いる Friedel-Crafts アルキル化反応の機構解明”，化学反応経路探索のニューフロンティア 2016，京都教育文化センター，京都府京都市，2016 年 9 月 12 日
81. 杉山佳奈美・高木牧人・住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“ステップのある Pt(111) 表面上での CO 酸化反応の経路の系統的探索”，化学反応経路探索のニューフロンティア 2016，京都教育文化センター，京都府京都市，2016 年 9 月 12 日
82. 山崎馨・原渕祐・前田理・武次徹也（北大院理），“プロトン付加フェニルアラニン・セリン 2 量体の多段階項間交差経路と光異性化反応路”，第 10 回分子科学討論会，神戸ファッションマート，兵庫県神戸市，2016 年 9 月 13-15 日
83. 市野智也・前田理・武次徹也（北大院理），“ $[\text{Rh}_x(\text{NO})_y]_z^+$ クラスターの系統的構造探索：構造と反応性”，第 10 回分子科学討論会，神戸ファッションマート，兵庫県神戸市，2016 年 9 月 13-15 日
84. 住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“分子内 Diels-Alder 反応におけるコンフォメーションエントロピー”，第 10 回分子科学討論会，神戸ファッションマート，兵庫県神戸市，2016 年 9 月 13-15 日
85. 高木牧人・前田理・武次徹也（北大院理），“人工力誘起反応法を用いた窒化ホウ素の結晶構造探索”，第 10 回分子科学討論会，神戸ファッションマート，兵庫県神戸市，2016 年 9 月 13-15 日
86. 三瓶匡史・住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“Friedel-Crafts アルキル化反応の位置選択性における助触媒効果の理論研究”，第 10 回分子科学討論会，神戸ファッションマート，兵庫県神戸市，2016 年 9 月 13-15 日
87. 杉山佳奈美・高木牧人・住谷陽輔・前田理・武次徹也（北大院理），“人工力誘起反応法による Pt(111) 表面上での CO 酸化反応の系統的経路探索”，第 10 回分子科学討論会，神戸ファッションマート，兵庫県神戸市，2016 年 9 月 13-15 日
88. 柴田沙織・原田安祐美・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“ナフトール-NHC 複合型キラル配位子を用いた末端アルキンの銅触媒アリル化による全炭素置換第四級不斉中心の構築”，第 63 回有機金属化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 9 月 14-16 日
89. 山崎絢香・長尾一哲・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“ホスフィン触媒と 1,1-ジボリルアルカン反応剤によるアルキンのアンチ-カルボホウ素化反応： γ -ボリル置換アリルボラン誘導体合成”，第 63 回有機金属化学討論会，早稲田大学 西早稲田キャンパス，東京都新宿区，2016 年 9 月 14-16 日
90. 岩佐豪・小林正人・佐藤貴暁・高敏・高木牧人・Andrey Lyalin・前田理・武次徹也（北大院理），“反応経路自動探索法と多変量解析を用いた銅クラスターの触媒活性予測と解析”，PCoMS シンポジウム&計算物質科学スパコン共有事業報告会，東北大学 片平キャンパス，宮城県仙台市，2016 年 10 月 17 日
91. 安田優人・大宮寛久・澤村正也（北大院理），“アリルホウ酸エステルとリン酸アリルによるエナンチオ選択的銅触媒アリル-アリルカップリング反応”，第 6 回 CSJ 化学フェスタ 2016，タワーホール船堀，東京都江戸川区，2016 年 11 月 14-16 日

92. 中原真希・高敏・A. Lyalin・武次徹也（北大院理），“h-BN/Au(111)に担持した金クラスターの触媒活性に関する理論的研究”，化学系学協会北海道支部 2017 年冬季研究発表会，北海道大学，北海道札幌市，2017 年 1 月 17-18 日
93. Sato, Takehiro; Shimamoto, Shigeru; Aritake, Kosuke; Urade, Yoshihiro; Mori, Seiji (Ibaraki University), “Theoretical Investigations of PGH2 to PGD2 Isomerization Reaction by Lipocalin-Type Prostaglandin D Synthase using Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Method”, 日本化学会第 97 春季年会，慶應義塾大学 日吉キャンパス，神奈川県横浜市，2017 年 3 月 16-19 日.
94. 小林正人・小野田遥・武次徹也（北大院理），“速度定数行列縮約法を用いた反応経路自動探索の効率化：多成分連結反応への応用”，第 119 回触媒討論会，首都大学東京 南大沢キャンパス，2017 年 3 月 21-22 日
95. Min Gao, Madashi Adachi, Andrey Lyalin, Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Wide Catalytic Activation Area of h-BN Surface by Doping C Atoms”, ナノ学会第 15 回大会，北海道立道民活動センターかでの 2・7，北海道札幌市，2017 年 5 月 10-12 日.
96. 岩佐豪・武次徹也（北大院理），”クラスターモデルでの酸化物担持金属クラスター触媒の電子物性”，ナノ学会第 15 回大会，北海道立道民活動センターかでの 2・7，北海道札幌市，2017 年 5 月 10-12 日.
97. 蝦名昌徳・原渕祐・岩佐豪・武次徹也（北大院理），”チオール分子で保護された金クラスターの励起状態と発光機構の解明”，ナノ学会第 15 回大会，北海道立道民活動センターかでの 2・7，北海道札幌市，2017 年 5 月 10-12 日.
98. 市野智也・前田理・Duo We・Thomas Dombra・Christophe Darce・Jean-Baptiste Sortais・Sylviane Sabo-Etienne・Mary Grellier（北大院理），“スチレンの Fe 触媒-脱水素ヒドロホウ素化に関する理論的研究：触媒サイクルと速度論シミュレーション”，第 20 回理論化学討論会，京都大学（吉田キャンパス）時計台国際交流ホール，京都府京都市，2017 年 5 月 16-18 日.
99. 高敏・中原真希・Andrey Lyalin・武次徹也（北大院理），“h-BN/Au(111)に担持した金クラスターの触媒活性に関する理論的研究”，第 20 回理論化学討論会，京都大学（吉田キャンパス）時計台国際交流ホール，京都府京都市，2017 年 5 月 16-18 日.
100. 岩佐豪・Andrey Lyalin・武次徹也（北大院理），“Cu/CeO₂ の電子物性と NO 解離反応に対する触媒活性”，第 20 回理論化学討論会，京都大学（吉田キャンパス）時計台国際交流ホール，京都府京都市，2017 年 5 月 16-18 日.
101. 原渕祐・斉田謙一郎・武次徹・前田理（北大院理），“ポテンシャル交差構造探索の新実装：勾配射影法と人工力誘起反応法に基づく構造探索”，第 20 回理論化学討論会，京都大学（吉田キャンパス）時計台国際交流ホール，京都府京都市，2017 年 5 月 16-18 日.
102. 藤岡茜・Martin C. Schwarzer・石井孝興・大宮寛久・森聖治・澤村正也（北大院理・茨城大理），“キラルプロリノール-ホスフィン-銅触媒と末端アルキンによる α -ケトエステル誘導体の不斉アルキニル化”，第 111 回有機合成シンポジウム 2017 年【春】，岡山大学津島キャンパス 創立五十周年記念館，岡山県岡山市，2017 年 6 月 8-9 日.
103. 小西菖太・岩井智弘・澤村正也（北大院理），“かご型ポレートホスフィンの合成と性質”，第 111 回有機合成シンポジウム 2017 年【春】，岡山大学津島キャンパス 創立五十周年記念館，岡山県岡山市，2017 年 6 月 8-9 日.
104. 小野田遼、黒田悠介、小林正人、武次徹也（北大院理），“スパースモデリングを利用した表面状態計算によるメタン水蒸気改質触媒活性評価”，日本コンピュータ化学会 2017 秋季年会，くまもと県民交流館パレア，熊本県熊本市，2017 年 10 月 21-22 日
105. 笹野裕介，小暮直貴，笠畑洸希，西山智弘，川島恭平，森聖治，岩渕好治（茨城大理・東北大院薬），“不斉配位子複合型ニトロキシラジカル/銅協働触媒を用いるラセミ第 2 級アルコールの酸化的速度論的光学分割”，第 43 回反応と合成の進歩シンポジウム，富山国際会議場，富山県富山市，2017 年 11 月 6-7 日
106. 岩渕雄太、高敏、武次徹也（北大院理），“C-X 結合解離反応における Pd クラスター触媒活性の理論的研究”，化学系学協会北海道支部 2018 年冬季研究発表会，北海道大学，札幌市，2018 年 1 月 16-17 日
107. 海老澤修一、岩佐豪、武次徹也（北大院理），“近接場光励起の電子ダイナミクス”，化学系学協会北海道支部 2018 年冬季研究発表会，北海道大学，札幌市，2018 年 1 月 16-17 日

108. 大場祐汰、小林正人、武次徹也（北大院理），“凍結内殻近似を利用した希土類錯体の簡便な電子状態計算法の開発”，化学系学協会北海道支部 2018 年冬季研究発表会，北海道大学，札幌市，2018 年 1 月 16-17 日
109. 小西里緒、高敏、堤拓朗、小野ゆり子、原潤祐、武次徹也（北大院理），“振動マッピング-AIMD 法による動的エネルギー分割の試み”，化学系学協会北海道支部 2018 年冬季研究発表会，北海道大学，札幌市，2018 年 1 月 16-17 日

<国際会議>

1. Soichiro Kawamorita, Ryo Murakami, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Rh- or Ir-Catalyzed N-Directed Borylation of Unactivated C(sp³)-H Bonds with Silica-Supported Monophosphine Ligands”, The Twelfth International Kyoto Conference on New Aspect of Organic Chemistry (IKCOC-12), Rihga Royal Hotel Kyoto, Dec.12-16, 2012.
2. Yurie Takayama, Yusuke Makida, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper-Catalyzed γ -Selective and Stereospecific Direct Allylic Alkylation of Terminal Alkynes”, The Twelfth International Kyoto Conference on New Aspect of Organic Chemistry (IKCOC-12), Rihga Royal Hotel Kyoto, Dec.12-16, 2012.
3. Tomohiro Iwai, Ryotaro Tanaka, Tomoya Harada, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Silica-Supported Tripod Triarylphosphines: Synthesis and Use for Preparation of Highly Active Pd Catalysts Enabling Room Temperature Cross-Coupling Reactions of Chloroarenes”, The Twelfth International Kyoto Conference on New Aspect of Organic Chemistry (IKCOC-12), Rihga Royal Hotel Kyoto, Dec.12-16, 2012.
4. Tomoya Harada, Tomohiro Iwai, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Development of Phosphine-Centered Cross-Linked Polymer for Transition Metal-Catalyzed Transformation of Unactivated Bonds”, 17th International Symposium on Organometallic Chemistry Directed towards Organic Synthesis (OMCOS17), Colorado State University, Ft. Collins, United States of America, Jul. 28-Aug. 1, 2013.
5. Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper-Catalyzed Stereodivergent Coupling Reactions between Chiral Allylic Phosphates and Alkylboranes”, 17th International Symposium on Organometallic Chemistry Directed towards Organic Synthesis (OMCOS17), Colorado State University, Ft. Collins, United States of America, Jul. 28-Aug. 1, 2013.
6. Hirohisa Ohmiya, Mika Yoshida, Yoshinori Shido, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper-Catalyzed Enantioselective Conjugate Addition and Allylic Substitution with Alkylboranes”, 17th International Symposium on Organometallic Chemistry Directed towards Organic Synthesis (OMCOS17), Colorado State University, Ft. Collins, United States of America, Jul. 28-Aug. 1, 2013.
7. Kentaro Hojoh, Yoshinori Shido, Hirohisa Ohmiya, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper(I)-Catalyzed Enantioselective Allylic Substitution Reaction with Alkylboranes”, The 16th International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHC-16), Hokkaido University, Sapporo, Japan, Aug. 8-9, 2013.
8. Takaoki Ishii, Ryo Watanabe, Toshimitsu Moriya, Hirohisa Ohmiya, Seiji Mori, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Enantioselective Alkynylation of Aldehydes Based on Cooperative Catalysis of Copper-Chiral Hydroxy Amino Phosphine Complexes”, The 16th International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHC-16), Hokkaido University, Sapporo, Japan, Aug. 4-9, 2013.
9. Ryo Murakami, Soichiro Kawamorita, Tomohiro Iwai, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Direct Borylation of Primary and Secondary C(sp³)-H Bond via Silica-Supported Monophosphine-Ir Catalysts”, The 16th International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHC-16), Hokkaido University, Sapporo, Japan, Aug. 4-9, 2013.
10. Min Gao, Andrey Lyalin, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Exploring Reaction Pathway of H₂ Dissociation on Au_n (n = 1 - 10) Clusters by Automated Reaction Path Search Methods”, The 16th International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHC-16), Hokkaido University, Sapporo, Japan, Aug. 4-9, 2013.
11. Ryohei Uematsu, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study of the mechanism of vinylogous mannich-type reaction activated by a water molecule”, The 9th Nanjing-Hokkaido-NIMS/MANA Joint Symposium on the Cutting Edge Chemistry, Nanjing, China, Oct. 11-13, 2013.
12. Takaoki Ishii, Hirohisa Ohmiya, Ryosuke Konno, Seiji Mori and Masaya Sawamura (Hokkaido

- University), “Hydrogen-bond-assisted Enantiocontrol of Copper-catalyzed Alkyne–Nitrone Coupling: Asymmetric Synthesis of β -Lactams”, The 8th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Osaka International Convention Center, Osaka, Japan, Nov. 25-28, 2013.
13. Tomohiro Iwai, Tomoya Harada, Ryotaro Tanaka, Ryo Murakami, Soichiro Kawamorita and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Silica-supported Tripod Phosphine: Application to Transition Metal Catalysis”, The Eighth International Symposium on Integrated Synthesis, Todaiji Temple Cultural Center, Nara, Japan, Nov. 29-Dec. 1, 2013.
 14. Min Gao, Satoshi Maeda, Andrey Lyalin, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “A new theoretical approach to find single bond activation pathways on metal cluster: A case study of H₂ dissociation on gold clusters”, 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Todaiji Culture Center, Nara, Japan, Dec. 2-6, 2013.
 15. Ryohei Uematsu, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Systematic exploration of reaction mechanism for a vinylogous Mannich-type reaction activated by a water molecule: kinetic control vs. thermodynamic control”, 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Todaiji Culture Center, Nara, Japan, Dec. 2-6, 2013.
 16. Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, Seiji Mori, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper-Catalyzed Stereodivergent Coupling Reactions between Chiral Allylic Phosphates and Alkylboranes”, 3rd FCC International Symposium, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 13-14, 2014.
 17. Tomoya Harada, Hajime Shimada, Tomohiro Iwai, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Control of Catalytic Environment of Transition-Metal Complexes with Threefold Cross-Linked Polystyrene-Phosphine Hybrids”, 3rd FCC International Symposium, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 13-14, 2014.
 18. Ryo Murakami, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Heteroatom-directed C(sp³)-H Borylations with a Silica-supported Monophosphine-Ir Catalyst”, 3rd FCC International Symposium, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 13-14, 2014.
 19. Yurie Takayama, Yusuke Makida, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper-Catalyzed γ -Selective and Stereospecific Direct Allylic Alkylation of Terminal Alkynes”, 3rd FCC International Symposium, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 13-14, 2014.
 20. Ryohei Uematsu, Eiji Yamamoto, Satoshi Maeda, Hajime Ito, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Systematic Exploration of Reaction Mechanism for Base-Mediated Borylation with Silylborane Method”, 3rd FCC International Symposium, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 13-14, 2014.
 21. Kiyoshi Tsunoda, Ryo Murakami, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Ir-Catalyzed C-H Borylations of Cyclopropanes and Cyclobutanes with a Silica-supported Monophosphine Ligand”, XXVI International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2014), Royton Sapporo Hotel, Sapporo, Japan, Jul. 13-18, 2014.
 22. Hiroaki Murayama, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper(I)-Catalyzed Intramolecular Hydroalkoxylation of Unactivated Alkenes”, The XXVI International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2014), Royton Sapporo Hotel, Sapporo, Japan, Jul. 13-18, 2014.
 23. Yuto Yasuda, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper-Catalyzed γ -Selective and Stereospecific Coupling between Secondary Allylic Phosphates and Secondary Alkylboranes”, The XXVI International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2014), Royton Sapporo Hotel, Sapporo, Japan, Jul. 13-18, 2014.
 24. Ryohei Uematsu, Eiji Yamamoto, Satoshi Maeda, Hajime Ito, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical Study of Base-Mediated Borylation with Silylborane Method by Artificial Force Induced Reaction Method”, XXVI International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2014), Royton Sapporo Hotel, Sapporo, Japan, Jul. 13-18, 2014.
 25. Min Gao, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Theoretical Study on the Mechanism of Ir-catalyzed Borylation of C-H Bond in 2-Alkylpyridine”, The XXVI International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2014), Royton Sapporo Hotel, Sapporo, Japan, Jul. 13-18, 2014.
 26. Min Gao, Daisuke Horita, Yuriko Ono, Andrey Lyalin, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study on the isomerization of small gold clusters induced by O₂ adsorption”, 17th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters, Fukuoka, Japan, Sep. 7-12, 2014.
 27. Min Gao, Andrey Lyalin, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University),

- “Automated prediction of pathways for single bond activations on small gold clusters: A case study of H₂ dissociation on neutral and charged Au_m (n = 1-12, m = 0, ±1)”, 17th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters, Fukuoka, Japan, Sep. 7-12, 2014.
28. Ryo Murakami, Kiyoshi Tsunoda, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Directed C–H Borylations of Cyclopropanes and Cyclobutanes Catalyzed by Silica-supported Monophosphine-Ir Complexes”, The 2nd International Conference on Organometallics and Catalysis, Todaiji Temple Cultural Center, Nara, Japan, Oct. 26-29, 2014.
 29. Takayoshi Yoshimura, Satoshi Maeda, Masaya Sawamura, Tetsuya Taketsugu, Keiji Morokuma, and Seiji Mori (Ibaraki University), “Exploring Full Catalytic Cycle of Rh(I)-BINAP Catalyzed Isomerization of Allylamines”, The 2nd International Conference on Organometallics and Catalysis, Todaiji Temple Cultural Center, Nara, Japan, Oct. 26-29, 2014.
 30. Masaya Sawamura, Tomohiro Iwai, Masahiro Ueno, and Hiori Okochi (Hokkaido University), “Medium-sized Ring Formation through Gold(I) Catalysis with Hollow-shaped Phosphine Ligands”, The 9th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (ICCEOCA-9), Eastin Hotel Petaling Jaya, Kuala Lumpur MALAYSIA, Dec. 1-5, 2014.
 31. Yuto Yasuda, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Copper-Catalyzed γ -Selective and Stereospecific Coupling between Secondary Allylic Phosphates and Secondary Alkylboranes”, The 2nd International Symposium on AMBITIOUS LEADER'S PROGRAM Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science “Ambition Across the Disciplines”, Akira Suzuki Hall, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Dec. 11-12, 2014.
 32. Kiyoshi Tsunoda, Ryo Murakami, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Ir-Catalyzed C–H Borylations of Cyclopropanes and Cyclobutanes with a Silica-supported Monophosphine Ligands”, The 2nd International Symposium on AMBITIOUS LEADER'S PROGRAM Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science “Ambition Across the Disciplines”, Akira Suzuki Hall, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Dec. 11-12, 2014.
 33. Takuya Ishitsuka, Yasuhiro Okuda, Robert K. Szilagy, Yasushi Nishihara, Seiji Mori (Ibaraki University), “Theoretical Studies on Palladium-Catalyzed exo-Selective Cyanoesterification of Methyl Cyanofornate onto Norbornene”, International workshop on Computational Science and Engineering (IWCSE 2014), Hong Kong Baptist University and City University of Hong Kong, Hong Kong, Dec. 13-16, 2014.
 34. Ayako Furuhashi, Takashi Imamura, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Reaction pathway of amine [(CH₃)_nNH_(3-n), n=1,2,3] and ozone”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
 35. Yuriko Ono, Kiyoshi Yagi, Toshiyuki Takayanagi, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical study of vibrational states of the HeCuF helium-containing complex”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
 36. Min Gao, Andrey Lyalin, Makito Takagi, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Application of Automated Reaction Path Search Methods to a Systematic Search of H₂ dissociation Pathways Catalyzed by Gold Clusters”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
 37. Guixiang Zeng, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu and Shigeyoshi Sakaki (Hokkaido University), “Catalytic Transfer Hydrogenation by Trivalent Phosphorus Compound: Phosphorus-Ligand Cooperation Compatible with PI/PIII Redox”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
 38. Yusuke Kondo, Masato Kobayashi, Takeshi Noro, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Spectroscopic constants of CeF molecule evaluated by highly accurate electronic structure calculations”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
 39. Yosuke Sumiya, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Kinetic Analysis of the reaction path network for C₆H₆”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
 40. Makito Takagi, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Explanation of Crystal Structures and their Transition Pathways by AFIR Method: Applications to Carbon and Boron Nitride”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
 41. Chihiro Saka, Ryohei Uematsu, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “A GRRM/AFIR Study on the Mechanism of Radical Generation and Propagation in the Autoxidation of Et₃B/O₂ System”, 31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Hokkaido University,

- Sapporo, Japan, Jun. 3-5, 2015.
42. Min Gao, Satoshi Maeda, Masaya Sawamura, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), "Automated search for reaction pathways of C(sp³)-H activation catalysed by silica-supported monophosphine-Ir complex", The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC), New Tsinghua Amphitheatre, Tsinghua University, Beijing, China, Jun. 8-13, 2015.
 43. Guixiang Zeng, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu, and Shigeyoshi Sakaki (Hokkaido University), "Mechanistic study on C-H alkylation of alkenes with alcohols catalyzed by a cationic Ru(II) hydride complex: direct C-O bond activation", The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC), New Tsinghua Amphitheatre, Tsinghua University, Beijing, China, Jun. 8-13, 2015.
 44. Masato Kobayashi and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), "Finite-temperature MP2 and density-matrix Laplace MP2: The relation between them and their application to the divide-and-conquer method", ICQC 2015 Satellite Symposium in Kobe "Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations", Kobe University, Kobe, Japan, Jun. 16-20, 2015.
 45. Tomoya Harada, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Bisphosphine-cross-linked Polystyrenes: Applications to Heterogeneous Ni Catalysis for C-H/C-O Coupling", The 18th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS 18), Sitges, Barcelona, Spain, Jun. 28-Jul. 2, 2015.
 46. Hirohisa Ohmiya, Ayumi Harada, Heng Zhang, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Copper-Catalyzed Enantioselective Allylic Alkylation of Terminal Alkyne Pronucleophiles", The 18th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS 18), Sitges, Barcelona, Spain, Jun. 28-Jul. 2, 2015.
 47. Ryo Murakami, Kiyoshi Tsunoda, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Heteroatom-directed C(sp³)-H Borylations of Functionalized Alkanes Catalyzed by Silica-supported Monophosphine-Ir systems", The 18th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS 18), Sitges, Barcelona, Spain, Jun. 28-Jul. 2, 2015.
 48. Kentaro Hojoh, Yoshinori Shido, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), "Construction of Quaternary Stereogenic Carbon Centers through Copper-Catalyzed Enantioselective Allylic Coupling with Alkylboranes", The 18th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS 18), Sitges, Barcelona, Spain, Jun. 28-Jul. 2, 2015.
 49. Masaya Sawamura, Tomoya Harada, Tomohiro Iwai (Hokkaido University), "Fourfold cross-linked Polystyrene-bisphosphine hybrids: Application to Ni-catalyzed cross-coupling reactions", 7th International Conference on Green and Sustainable Chemistry (GSC-7) and 4th JACI/GSC Symposium, Hitotsubashi University, Tokyo, Japan, Jul. 5-8, 2015.
 50. Takeshi Iwasa and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), "Quantum Chemical Study on the interaction between nonuniform electric field and molecular vibrations", The 10th Asia-Pacific Conference on Near-field Optics (APNFO10), Hakodate Research Center for Fisheries and Oceans, Hakodate, Japan, Jul. 7-10, 2015.
 51. Yusuke Kondo, Masato Kobayashi, Takeshi Noro, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), "Benchmarking all-electron basis sets for lanthanoid from spectroscopic constant calculations of CeF", The 11st Hokkaido Univ.-Nanjing Univ. Joint symposium: 2015 HU-NU-NIMS/MANA Joint symposium, Nanjing, China, Oct. 16-18, 2015.
 52. Masaya Sawamura, Tomoya Harada, Hajime Shimada, and Tomohiro Iwai (Hokkaido University), "Ni-Catalyzed Amination of Chloroarenes: Solving Problems with Polystyrene-Bisphosphine Hybrid Ligands", The 10th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, 85 SKY TOWER HOTEL, Kaohsiung, Taiwan, Nov. 2-5, 2015.
 53. Masato Kobayashi, Yusuke Kuroda, Kin-ya Akiba, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), "Theoretical study on the ligand exchange and ligand coupling reactions of hypervalent Sb and Te compounds", 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15-20, 2015.
 54. Yusuke Sumiya, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), "Kinetic analysis for complex reaction networks: Application to organic reactions", 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15-20, 2015.
 55. Min Gao, Satoshi Maeda, Tomohiro Iwai, Masaya Sawamura, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), "Theoretical study on the cavity effect of semihollow-ligands in gold(I)-catalyzed alkyne cyclizations", 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015),

- Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.
56. Makito Takagi, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Structure of $(\text{H}_2\text{O})_{20}$: Quantum chemical exploration of stable structures”, 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 15–20, 2015.
 57. Makito Takagi, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Quantum chemical study of structures of $(\text{H}_2\text{O})_{10}$ and $(\text{H}_2\text{O})_{20}$ ”, Hokkaido University - University of California, Berkeley Joint Symposium on Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jan. 7, 2016.
 58. Yusuke Kuroda, Masato Kobayashi, Kin-ya Akiba, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical Study on the Ligand Coupling Reaction (LCR) of Pentacoordinate Hypervalent Sb Compounds”, Hokkaido University - University of California, Berkeley Joint Symposium on Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Jan. 7, 2016.
 59. Takayoshi Yoshimura, Satoshi Maeda, Masaya Sawamura, Tetsuya Taketsugu, Keiji Morokuma, and Seiji Mori (Ibaraki University, Hokkaido University), “Exploring Full Catalytic Cycle of Rh(I)-BINAP Catalyzed Isomerization of Allylic Amines”, the Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 7), Kaohsiung, Taiwan, Jan. 25–28, 2016.
 60. Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Phosphine-Catalyzed Anti-Selective Carboboration of Alkynoates with Organoboranes”, The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium "Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Feb. 23–24, 2016.
 61. Shota Konishi, Tomohiro Iwai, Tatsuya Miyazaki, Soichiro Kawamorita, Natsumi Yokokawa, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Development of a Silica-Supported Triptycene-Type Phosphine and Its Application to Pd-Catalyzed Suzuki–Miyaura Coupling of Chloroarenes”, The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium "Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Feb. 23–24, 2016.
 62. Makito Takagi, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Exploration of Crystal Structures by Artificial Force Induced Reaction Method: Applications to Carbon Crystal”, The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium "Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Feb. 23–24, 2016.
 63. Yusuke Kuroda, Masato Kobayashi, Kin-ya Akiba, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Quantum Chemical Investigation on the Mechanism of Ligand Coupling Reactions of Hypervalent Sb Compounds”, The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium "Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations, Hokkaido University, Sapporo, Japan, Feb. 23–24, 2016.
 64. Masato Kobayashi, Yusuke Kuroda, Kin-ya Akiba, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical Studies on the Stimuli-Responsive Chemical Species: Reaction of Hypervalent Sb Compounds and Structure of Ultralong C-C Bond”, The 3rd International Symposium for Young Chemists on Stimuli-Responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules, Nagoya University, Nagoya, Japan, Mar. 9–10, 2016.
 65. Hiroaki Murayama, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Phosphine-Catalyzed Vicinal Acylcyanation of Alkynoates” Peking University & Hokkaido University Joint Seminar on Organic Chemistry and Chemical Biology, Peking, China, May 26–27, 2016.
 66. Seiji Mori, Ryosuke Konno, Martin C. Schwarzer, H. Takahashi, Mamoru Tobisu, and Naoto Chatani (Ibaraki University, Osaka University), “Theoretical Study on Ni(0)-Catalyzed Cross-Coupling of Methoxyarenes with Arylboronic Esters via C-O Bond Activation”, 10th congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2016), Castellón de la Plana, Castellón, Spain, Jun. 28–Jul. 1, 2016.
 67. 漆畑敬太・Rui-qin Zhang・森聖治 (Ibaraki University), “Computational study of Ullmann coupling catalyzed by a single metal atom”, 32nd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Sonic City Hall, Saitama, Japan, Jun. 1–3, 2016.
 68. Kenichiro Saita, Yu Harabuchi, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of $\text{fac}[\text{Re}(\text{bpy})(\text{CO})_3(\text{PR}_3)]^+$ complex”, The 23rd IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC23), UNSW Australia, Sydney, Australia, Jul. 3–8, 2016.
 69. Tomoya Ichino, Tetsuya Taketsugu, Toshimichi Ohmura, Michinori Suginome, and Satoshi Maeda (Hokkaido University, Kyoto University), “Theoretical Study on Organocatalytic Diboration of

- Pyrazines: Radical-Mediated Catalytic Reaction”, The 23rd IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC23), UNSW Australia, Sydney, Australia, Jul. 3–8, 2016.
70. Yosuke Sumiya, Tetsuya Taketsugu, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Kinetic Analysis for Complex Reaction Networks: Importance of Conformational Entropy”, The 23rd IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC23), UNSW Australia, Sydney, Australia, Jul. 3–8, 2016.
 71. Hirohisa Ohmiya, Heng Zhang, Saori Shibata, Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Construction of Quaternary Stereogenic Carbon Centers through Copper-Catalyzed Enantioselective C–H Allylic Alkylation of Azoles with a Naphthol-NHC Chiral Ligand”, 20th International Symposium on Homogeneous Catalysis (ISHCXX), Kyoto Terra, Kyoto, Japan, Jul. 10–15, 2016.
 72. Martin C. Schwarzer, Takaoki Ishii, Hirohisa Ohmiya, Masaya Sawamura, and Seiji Mori (Ibaraki University, Hokkaido University), “Experimental and Computational Investigations on the Enantioselective Alkynylation of α -Ketosesters via Copper Catalysis”, 20th International Symposium on Homogeneous Catalysis (ISHCXX), Kyoto Terra, Kyoto, Japan, Jul. 10–15, 2016.
 73. Min Gao, Makito Takagi, Andrey Lyalin, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Systematic investigation on the geometry effect on the catalytic activity of gold clusters”, International Symposium on small particles and inorganic Clusters, Jyväskylä, Finland, Aug. 14–19, 2016.
 74. Kenichiro Saita, Yu Harabuchi, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Mechanism of the Photochemical Ligand Substitution of Tricarbonyl Re(I) Complex”, Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan, Oct. 26–28, 2016.
 75. Yu Harabuchi, Kenichiro Saita, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Systematic Exploration of Non-radiative Decay Pathways: Application to Photoreactions”, Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan, Oct. 26–28, 2016.
 76. Tomoya Ichino, Satoshi Maeda, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “A Computational Study on Structures and Reactivity of $[\text{Rh}_6(\text{NO})_n]_q^+$ ($n = 0-7$) ($q = 0, 1$) by Artificial Force Induced Reaction Method”, Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan, Oct. 26–28, 2016.
 77. Martin C. Schwarzer, Ryosuke Konno, H. Takahashi, Mamoru Tobisu, Naoto Chatani, Seiji Mori (Ibaraki University, Osaka University), “Theoretical Study of Nickel-Catalyzed Cross-Coupling of Methoxyarenes with Arylboronic Esters via C–O Bond Cleavage”, International Symposium on C–O Bond Activation, Himeji Chamber of Commerce and Industry, Hyogo, Japan, Oct. 25–27, 2016.
 78. Keita Urushibata, Ruiqin Zhang, and Seiji Mori (Ibaraki University), “Computational study of Ullmann coupling catalyzed by metal atoms”, 10th International Conference on Computational Physics (ICCP10), Macao, China, Jan. 16–20, 2017.
 79. Tetsuya Taketsugu, Rina Yamamoto, Takuro Tsutsumi, Yu Harabuchi, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Ab initio MD study of branching reactions in the excited-state potential energy surface”, 57th Sanibel Symposium, St. Simons Island, USA, Feb. 19–24, 2017.
 80. Min Gao, Ben Wang, Masashi Adachi, Andrey Lyalin, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Promising catalytic activity of h-BN monolayer by doping C atoms”, 57th Sanibel Symposium, St. Simons Island, USA, Feb. 19–24, 2017.
 81. Andrey Lyalin, Kohei Uosaki, Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical Design of Electrocatalysts for Oxygen Reduction Reaction: When Boron Nitride Meets Gold”, 2017 International Workshop on Electrified Interfaces for Energy Conversions (EIC2017), Shonan Village Center, Kanagawa, Japan, May 18–21, 2017.
 82. Tomoya Ichino and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Coverage and charge dependence of structures and reactivity on $[\text{Rh}_6(\text{NO})_n]_q^+$ ($n = 0-7$) ($q = 0, 1$): A computational study”, 33rd symposium on chemical kinetics and dynamics, Nagoya, Japan, Jun. 7–9, 2017.
 83. Yosuke Sumiya and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Reaction mechanism and kinetics of organic multicomponent reactions studied by combined automatic reaction path search and rate constant matrix contraction methods”, 33rd symposium on chemical kinetics and dynamics, Nagoya, Japan, Jun. 7–9, 2017.
 84. Makito Takagi, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Exhaustive search for carbon crystal

- structures by artificial force induced reaction method”, Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 (CPMD 2017), EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 18-20, 2017.
85. Toshikazu Fujimori, Masato Kobayashi, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Automatic error control in the divide and conquer quantum chemical calculations”, Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 (CPMD 2017), EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 18-20, 2017.
86. Masato Takenaka, Takeshi Iwasa, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Theoretical Study on Near-field Infrared Absorption Spectroscopy using the Multipolar Hamiltonian”, Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 (CPMD 2017), EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 18-20, 2017.
87. Takuro Tsutsumi, Rina Yamamoto, Yu Harabuchi, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Spin-Flip TDDFT Study of Photoisomerization Dynamics of Monomethyl-stilbene”, Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 (CPMD 2017), EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 18-20, 2017.
88. Maki Nakahara, Min Gao, Andrey Lyalin, Masato Kobayashi, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “The Prediction of The Stability of Gold Clusters Supported h-BN/Au(111) by Machine Learning”, The 13th Jiangxing University-Nanjing University-Hokkaido University-NIMS Joint Symposium, Jiaying, China, Oct. 27-28, 2017.
89. Toshikazu Fujimori, Masato Kobayashi, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “Automatic energy-error control in the large-scale quantum chemical calculations based on the divide-and-conquer method”, The 13th Jiangxing University-Nanjing University-Hokkaido University-NIMS Joint Symposium, Jiaying, China, Oct. 27-28, 2017.
90. Ronald L. Reyes, Tomoya Harada, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Catalytic Asymmetric Heteroatom-Directed C(sp³)-H Borylation with Chiral Monophosphine Ligands”, The 13th Jiangxing University-Nanjing University-Hokkaido University-NIMS Joint Symposium, Jiaying, China, Oct. 27-28, 2017.
(前述「(1)原著論文発表」において取り下げられた論文 No. 133 に関連する発表のため、成果から除外いたします)
91. Yuto Yasuda, Hirohisa Ohmiya, and Masaya Sawamura (Kanazawa University, Hokkaido University), “Asymmetric Copper Catalysis with Phenol-NHC Chiral Ligands: A Case of Allyl-Allyl Coupling with Organoboron Reagents”, 1st Singapore Japan Germany Trilateral Symposium on Precision Synthesis & Catalysis, Nanyang, Singapore, Nov. 20-21, 2017.
92. Kanami Sugiyama, Makito Takagi, Yosuke Sumiya, Kenichiro Saita, and Satoshi Maeda (Hokkaido University), “Global Reaction Route Network for H₂O and HCOOH on the Pt(111) Surface and Its Analysis”, The 5th International Symposium on AMBITIOUS LEADER’S PROGRAM Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science, Hokkaido, Japan, Nov. 21, 2017.
93. Eri Iijima, M. Paul Gleeson, Masaki Unno, and Seiji Mori (Ibaraki University), “Structural QM/MM Investigation of Bilin Reductase PcyA-substrate complex” 2nd International Symposium of Quantum Beam Science at Ibaraki University, Ibaraki, Japan, Dec. 8-10, 2017.
94. Yusuke Kondo, Masato Kobayashi, Tomoko Akama, Takeshi Noro, and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University), “All-Electron Relativistic Computations on the Low-Lying Electronic States of CeF with Spin-Orbit Coupling Effects”, International Symposium "Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory", Tokyo Metropolitan University, Dec. 8-9, 2017.
95. Nozomi Arima, Tomohiro Iwai, and Masaya Sawamura (Hokkaido University), “Ni-catalyzed Murahashi Coupling in Polystyrene Gel”, IRCCS-JST CREST Joint Symposium “Chemical Sciences facing difficult challenges”, Kyushu University, Japan, Jan. 24-26, 2018.

(4) 知財出願

① 国内出願 (2件)

1. 有機高分子三点架橋型ホスフィン、それを配位子とする遷移金属錯体および触媒、澤村 正也、岩井 智弘、原田 友哉、国立大学法人北海道大学、2014年3月6日、特願 2015-504399 (特許第 6274202号)
2. 高分子遷移金属錯体、その製造方法及びその利用、澤村 正也、岩井 智弘、原田 友哉、国立大学法人北海道大学、2016年3月10日、特願 2017-505406

② 海外出願 (2件)

1. 有機高分子三点架橋型ホスフィン、それを配位子とする遷移金属錯体および触媒、澤村 正也、岩井 智弘、原田 友哉、国立大学法人北海道大学、2014年3月6日、PCT/JP2014/055860

2. 高分子遷移金属錯体、その製造方法及びその利用、澤村 正也、岩井 智弘、原田 友哉、国立大学法人北海道大学、2016 年 3 月 10 日、PCT/JP2016/057632

③ その他の知的財産権

該当無し

(5) 受賞・報道等

① 受賞 (62 件→61 件に修正)

(受賞 No. 57 の発表については、前述「(1)原著論文発表」において取り下げられた論文 No. 133 に関連する発表のため、件数を修正するものです)

1. 植松遼平、“第 4 回北海道大学サステナビリティ学生研究ポスターコンテスト優秀賞”、2012 年 10 月 16 日
2. Masaya Sawamura, “Asian Core Program Lectureship Award”, The 7th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Dec 11-14, 2012.
3. 岩井智弘、第 29 回井上研究奨励賞、2013 年 2 月 4 日
4. 前田理、平成 24 年度日本化学会進歩賞、2013 年 3 月 23 日
5. Min Gao, Poster award for The Sixteenth International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis (ISHHC-16), Aug. 8, 2013.
6. 岩井智弘、第 112 回触媒討論会 若手優秀講演賞、2013 年 9 月 19 日
7. 植松遼平、第 7 回分子科学討論会 分子科学会優秀ポスター賞、2013 年 10 月 29 日
8. 澤村正也、Asian Core Program Lectureship Award, 2013 年 11 月 28 日
9. 中山哲、平成 25 年度 日本化学会北海道支部奨励賞、2014 年 1 月 29 日
10. 岩井智弘、有機合成化学協会 高砂香料工業 研究企画賞、2014 年 2 月 20 日
11. 澤村正也、平成 25 年度 北海道大学研究総長賞、2014 年 3 月 4 日
12. 植松遼平、日本化学会第 94 春季年会 (2014) 学生講演賞、2014 年 4 月 10 日
13. 大宮寛久、平成 25 年度 日本化学会進歩賞、2014 年 3 月 28 日
14. 森聖治 (ほか 4 名)、BCSJ 賞、2014 年 6 月 15 日
15. 高木牧人、平成 26 年度 夏期日本化学会北海道支部優秀講演賞、2014 年 9 月 24 日
16. 村上遼、第 61 回有機金属化学討論会 ポスター賞、2014 年 10 月 15 日
17. 北條健太郎、第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014 優秀ポスター発表賞、2014 年 11 月 10 日
18. 安田優人、第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014 優秀ポスター発表賞、2014 年 11 月 10 日
19. 前田理、科学技術・学術政策研究所 科学技術への顕著な貢献 2014 (ナイスステップな研究者)、2014 年 12 月 19 日
20. 大宮寛久、Banyu Chemist Award (BCA) 2014、2014 年 12 月 1 日
21. 大宮寛久、Thieme Chemistry Journal Award 2015、2014 年 12 月 6 日
22. 澤村正也、有機合成化学協会 日産化学・有機合成新反応/手法賞、2015 年 2 月 19 日
23. 大宮寛久、有機合成化学協会 中外製薬 研究企画賞、2015 年 2 月 26 日
24. 大宮寛久、平成 26 年度北海道大学教育総長賞 奨励賞、2015 年 3 月 11 日
25. 大宮寛久、平成 26 年度北海道大学研究総長賞 奨励賞、2015 年 3 月 11 日
26. 長尾一哲、日本化学会第 95 春季年会 (2015) 学生講演賞、2015 年 4 月 13 日
27. 大宮寛久、平成 27 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞、2015 年 4 月
28. 原渕祐、日本化学会第 95 春季年会 (2015) 優秀講演賞 (学術)、2015 年 4 月 13 日
29. 岩佐豪、第 18 回理論化学討論会 優秀講演賞、2015 年 6 月 11 日
30. Min Gao, the 15th International Congress of Quantum Chemistry, Best Posters of the Congress, Jun. 13, 2015.
31. 北條健太郎、第 32 回有機合成化学セミナー 優秀ポスター賞、2015 年 9 月
32. 前田理、Banyu Chemist Award (BCA) 2015、2015 年 11 月
33. 今野遼佑、第 26 回日本化学会関東支部茨城地区研究交流会 優秀賞、2015 年 11 月
34. 石塚拓也、The 11th International Student Conference at Ibaraki University 奨励賞、2015 年 12 月
35. 前田理、第 12 回日本学術振興会賞、2015 年 12 月

36. 前田理、Thieme Chemistry Journal Award 2016、2015年12月
37. 三瓶匡史、化学系学協会北海道支部 2016年冬季研究発表会優秀講演賞(ポスター部門)、2016年1月
38. 森田啓嗣、化学系学協会北海道支部 2016年冬季研究発表会優秀講演賞(ポスター部門)、2016年1月
39. 長尾一哲、The 4th FCC International Symposium Poster Award、2016年2月
40. 高木牧人、The 4th FCC International Symposium Poster Award、2016年2月
41. 高木牧人、平成27年度北海道大学研究総長賞 奨励賞、2016年2月
42. 前田理、平成27年度北海道大学研究総長賞 奨励賞、2016年2月
43. 前田理、Lectureship Award MBLA 2015、2016年2月
44. 原渕祐、第19回理論化学討論会優秀講演賞、2016年6月
45. 住谷陽輔、第19回理論化学討論会優秀ポスター賞、2016年6月
46. 前田理、平成28年度分子科学研究奨励森野基金、2016年9月
47. Min Gao、第10回分子科学討論会 分子科学会優秀講演賞、2016年10月
48. 藤森俊和、The 4th International Symposium on ALP Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science, Poster Award, 2016年11月
49. 安田優人、第6回CSJ化学フェスタ2016 優秀ポスター発表賞、2016年12月
50. 高木牧人、第6回CSJ化学フェスタ2016 優秀ポスター発表賞、2016年12月
51. 前田理、平成28年度北海道大学研究総長賞 奨励賞、2017年1月
52. 澤村正也、名古屋メダル (Silver Medal)、2017年1月
53. 大宮寛久、The Most Outstanding Referees for Angewandte Chemie, 2017年3月
54. 岩井智弘、日本化学会 第97春季年会(2017) 優秀講演賞(学術)、2017年3月
55. Martin C. Schwarzer、日本化学会 第97春季年会(2017) 優秀講演賞(学術)、2017年3月
56. 藤岡茜、第111回有機合成シンポジウムポスター発表優秀賞、2017年6月
57. Ronald L. Reyes、第64回有機金属化学討論会 ポスター賞、2017年9月
(前述「(1)原著論文発表」において取り下げられた論文No.133に関連する発表のため、成果から除外いたします)
58. 高木牧人、Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 Best Poster Award, 2017年10月
59. 安田優人、2017 Singapore Japan Germany Trilateral Symposium on Precision Synthesis & Catalysis Poster Award, 2017年11月
60. 岩井智弘、平成29年度日本化学会北海道支部奨励賞、2018年1月
61. 前田理、平成29年度北海道大学教育研究総長表彰、2018年3月
62. 澤村正也、根岸賞(優秀賞)、2018年3月

②マスコミ(新聞・TV等)報道(プレス発表をした場合にはその概要も記入してください。)
該当なし

③その他
該当なし

(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

・開発した有機高分子多点架橋ホスフィンのC-Nカップリングへの利用について、(株)東ソー有機化学(現・東ソーファインケム)と共同研究中

② 社会還元的な展開活動
該当なし

§ 7. 研究期間中の活動

(2) 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2013年 2月7日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	10人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2013年 3月6日	澤村 G-森 G ミーティング (非公開)	北海道大学	5人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2013年 5月27日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	12人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2013年 7月16日	チーム全体ミーティング (非公開)	北海道大学	12人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2013年 10月4日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	5人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2014年 2月12日	チーム全体ミーティング (非公開)	北海道大学	15人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2014年 2月17日	澤村 G-森 G ミーティング (非公開)	北海道大学	5人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2014年 5月7日	澤村 G-森 G ミーティング (非公開)	茨城大学	4人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2014年 5月9日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	5人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2014年 8月4日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	8人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2014年 10月1日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	5人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2014年 11月27日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	4人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2015年 1月6日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	4人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2015年 2月13日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道大学	3人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング
2015年 2月23日	澤村 G-森 G ミーティング (非公開)	茨城大学	6人	研究進捗報告と方針策定のためのミーティング

2016年 3月17日	澤村 G-森 G ミーティング (非公開)	北大 東京オフィ ス	3人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2016年 2月2日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道 大学	7人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2015年 8月14日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道 大学	6人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2015年 7月6日	澤村 G-森 G ミーティング (非公開)	北大 東京オフィ ス	3人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2015年 4月20日	澤村 G-森 G ミーティング (非公開)	北海道 大学	4人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2017年 1月25日	澤村 G-森 G ミーティング (非公開)	名古屋 大学	3人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2016年 12月8日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道 大学	4人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2016年 7月28日	研究総括 サイトビジット (非公開)	北海道 大学	15人	研究進捗報告と 研究環境の確認
2016年 7月6日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道 大学	6人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2016年 11月4日	武次 G-森 G ミーティング (非公開)	北海道 大学	4人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング
2018年 1月23日	澤村 G-武次 G ミーティング (非公開)	北海道 大学	3人	研究進捗報告と 方針策定のためのミーティング