

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 21 日現在

機関番号：15401

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2012～2016

課題番号：24109002

研究課題名(和文) 感応性高配位典型元素化合物の創製と反応

研究課題名(英文) Preparation and Reactions of Stimuli-responsive High-coordinate Main Group Element Compounds

研究代表者

山本 陽介 (Yamamoto, Yohsuke)

広島大学・理学研究科・教授

研究者番号：50158317

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 71,600,000円

研究成果の概要(和文)：山本は、新規に合成した三座配位子を用いて超原子価硫黄・セレンラジカルの単離に初めて成功した。中野(A01)が予言してきたチチバピン型化合物の非線形光学特性について、新規に合成した窒素原子を含む二量体の酸化還元特性を検討し、中野の予言通りの非線形光学特性をしめすことを明らかにできた(鎌田(A01)と共同研究)。

中野は、山本らにより合成されたチチバピン炭化水素骨格と等電子構造を有するN原子を含む新種の化合物の電子状態と光物性を開殻性の観点から量子化学計算により明らかにした。また、A02班関口との共同研究によりSi、Geを含む2置換ベンゼンや4員環系の開殻性と非線形光学物性の相関を解明した。

研究成果の概要(英文)：Yamamoto: Using a newly prepared tridentate ligand, new hypervalent sulfur and selenium radicals could be isolated and characterized. The corresponding sulfur anion bearing Li⁺ was used as cathode-active materials together with a silyl radical species which was developed by Sekiguchi as the anode. A series of pentacoordinated nitrogen radical cations by using of newly prepared tridentate ligands could be synthesized and the dimer showed greatly enhanced two-photon absorption (TPA) properties.

Nakano: Nakano et al. theoretically investigated the electronic states and optical properties of Chichibabin's hydrocarbon derivatives including N atoms synthesized by Yamamoto et al. based on the open-shell character. Nakano et al. also succeeded in clarifying the correlation between open-shell character and nonlinear optical properties of Si/Ge-substituted benzenes and four-membered ring compounds including heavy main group elements in collaboration with Sekiguchi et al. (A02 group).

研究分野：有機化学

キーワード：感応性 硫黄 セレン ラジカル 酸化還元 二光子吸収 開殻性 理論計算

1. 研究開始当初の背景

代表者は合成および構造解析に必要な主要設備を所有し、元素分析や質量分析についても所属大学に整備されている。研究分担者である、中野教授および岸助教のグループは、開殻化学種計算の世界的リーダーであり、すでに共同研究実績がある。領域全体に対しても開殻系化学種の電子状態や反応性の解明などに貢献することができる。

2. 研究の目的

これまでの高配位典型元素化学の研究にもとづき、感応性高配位 16 族典型元素化合物と反応の研究を目的とする。領域内研究強力に推進する。特に、1) 生体内反応のモデル研究による生体内酸化反応機構の解明、2) 新規高配位 16 族元素安定ラジカルの創製によるリビングラジカル重合触媒への応用を重点課題とする。本研究は特に A04 班井上、A01 班の山子と密接に関連した研究であり、生体内反応における感応性化学種の役割解明、材料開発触媒研究における新規感応性化学種の提供など、世界でも類を見ない連携研究であり、感応性化学種の新学術領域の発展に大きく貢献すると期待できる。

3. 研究の方法

(1) 生体内反応のモデル研究による生体内酸化反応機構の解明

高配位 16 族元素反応中間体の創製と単離：A04 班井上らにより発見された生体内酸化反応における超原子価硫黄化合物はこれまでに小分子系でも報告されていない化合物であり、イミダゾリル配位子系などのモデル系を構築して、その生成条件や反応中間体としての安定性・反応性を評価する。

酸化反応中間体(3)の創製と反応性：新規三座位配位子系を用いて、二価硫黄化合物の酸化反応において短寿命中間体の可能性のある硫黄を含むジオキシラシランの合成と単離に取り組む。

超原子価 16 族キラル化合物の創製と反応の立体化学：超原子価硫黄化合物の反応性検討の一環として、求核試薬との反応性の立体化学について検討する。

研究成果を A04 班の井上にフィードバックするとともに、A04 班吉澤による大規模計算についても検討し、実在の生体系反応の解明を進める。

(2) 新規高配位 16 族元素安定ラジカルの創製によるリビングラジカル重合触媒への応用

用：A01 班山子の研究によれば、リビングラジカル重合では触媒能はラジカルの安定性にも依存すると結論されているので、新規配位子系を合成し、超原子価 16 元素ラジカル(硫黄・セレン・テルル)を安定化する。山子と密接に連携して、ラジカルドーマント種としての高効率触媒系の開発を図る。研究分担中野および A02 班安倍・古川との共同研究により、実験的にも電子状態解析を行う。

4. 研究成果

山本はこれまでに新規に合成していた超原子価硫黄およびセレンラジカルを正極に用いて、A02 班関口が開発してきたケイ素ラジカルを負極としたオールラジカル電池の共同研究に着手した。期待通りの性能は出つつあったが、我々の化合物の電解液への溶解性が高すぎたため、繰り返し特性がまずまずの値しか出せなかった。そこで、新たに、溶解性が小さく分子量も小さい超原子価硫黄化合物の合成に取り組んだ。苦労したが少量の化合物合成に成功し、電極材料としての予備実験を行ったところ、約 200mAh g⁻¹ の放電容量が得られ、リチウム電池よりも大きな容量を示した。この結果国内で特許を 1 件出願した。同時に、新規超原子価硫黄ラジカルの合成と構造解析、電池への応用の論文を新学術領域内での共同研究論文として投稿し、アメリカ化学会誌に掲載された。さらに、電池への応用展開の改良を目指して、系を設計しなおした超原子価硫黄ラジカルの合成とその電池としての評価の論文も掲載された。

また、新規一重項ジラジカルの新規系の単離に成功し、研究分担者中野、A01 班鎌田、A02 班古川との共同研究成果としてまとめることができた。

中野は、山本らにより合成されたチチバピン炭化水素骨格と等電子構造を有する N 原子を含む新種の化合物の電子状態と光物性を開殻性の観点から量子化学計算により明らかにした。また、A02 班関口との共同研究により Si, Ge を含む 2 置換ベンゼンや 4 員環系の開殻性と非線形光学物性の相関を解明した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 51 件)

1. S.-i. Fuku-en, J. Yamamoto, K. Furukawa, D. Hashizume, N. Kawata, *Y. Yamamoto, "Oxidation of Allenes Bearing 1,8-Diphenoxy or Diaryloxyacridene Moieties," *J. Phys. Org. Chem.*, **30**, e3665 (2017). DOI: 10.1002/poc.3665(査読有)
2. K. Fukuda, Y. Suzuki, H. Matsui, T. Nagami, Y. Kitagawa, B. Champagne, K. Kamada, Y. Yamamoto, and M. Nakano*, Tuning nonlinear optical properties by altering the diradical and charge transfer characters of Chichibabin's hydrocarbon derivatives, *Chem Phys Chem*, 2017, **18**, 142–148. DOI: 10.1002/cphc.201601226. (査読有)
3. Y. Imada, H. Nakano, K. Furukawa, R. Kishi, M. Nakano, H. Maruyama, M. Nakamoto, A. Sekiguchi, M. Ogawa, T. Ohta, *Y. Yamamoto, "Isolation of Hypervalent Group-16 Radicals and Their Application in Organic-Radical Batteries", *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 479-482. (2016). DOI: 10.1021/jacs.5b10774(査読有)
4. Y. Imada, T. Kukita, H. Nakano, *Y.

- Yamamoto, "Easy Access to Martin's Hypervalent Sulfur Anions toward an Electrode Material for Organic Rechargeable Batteries", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **89**, 546-568. (2016). DOI: 10.1246/bcsj.20160012. (査読有)
5. T. Hirofuji, T. Ikeda, T. Haino, Y. Yamamoto, *A. Kawachi, "Synthesis of Pentacene-type Silaborin via Double Dehydrogenative Cyclization of 1,4-Diboryl-2,5-disilylbenzene" *Chemistry-A European Journal.*, **22**, 9734 – 9739 (2016) DOI: 10.1002/chem.201600785. (査読有)
 6. J. D. Smith, J. R. Logan, L. E. Doyle, R. J. Burford, S. Sugawara, C. Ohnita, Y. Yamamoto, *W. E. Piers, D. M. Spasyuka, J. Borau-Garcia, "Cationic mono and dicarbonyl pincer complexes of rhodium and iridium to assess the donor properties of PCCarbeneP ligands" *Dalton Trans.*, **45**(2), 12669-12679 (2016). DOI: 10.1039/c6dt02615j (査読有)
 7. S. Morisako, R. Shang, *Y. Yamamoto, "Synthesis of a Sterically Demanding Dispiro-piperidine and its Application in Monoamido-dialkyl Zincite Complexes" *Inorg. Chem.*, **55**(20), 10767– 10773 (2016). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b01965(査読有)
 8. A. Tamaki, *S. Kojima, Y. Yamamoto, "Examination of Pyridazine as a Possible Scaffold for Nucleophilic Catalysis", *J. Org. Chem.*, **81**(19), 8710–8721 (2016). DOI: 10.1021/acs.joc.6b00630. (査読有)
 9. *M. Nakano, S. Ito, T. Nagami, Y. Kitagawa, T. Kubo, "Quantum Master Equation Approach to Singlet Fission Dynamics of Realistic/Artificial Pentacene Dimer Models: Relative Relaxation Factor Analysis," *J. Phys. Chem. C*, **120**(40), 22803-22815 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b06402(査読有)
 10. S. Takamuku, Y. Kitagawa, T. Nagami, J. Fujiyoshi, B. Champagne, *M. Nakano, "Origin of the Enhancement of the Second Hyperpolarizabilities of Metal–Carbon Bonds," *J. Phys. Chem. A*, **120**(34), 6838-6845 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpca.6b05711(査読有)
 11. *M. Nakano, B. Champagne, "Nonlinear optical properties in open-shell molecular systems", *WIREs Comput Mol Sci*, **6**(2), 198-210 (2016). DOI: 10.1002/wcms.1242(査読有)
 12. M. Nakano, K. Fukuda, B. Champagne, "Third-Order Nonlinear Optical Properties of Asymmetric Non-Alternant Open-Shell Condensed-Ring Hydrocarbons: Effects of Diradical Character, Asymmetry, and Exchange Interaction", *J. Phys. Chem. C*, **120**(2), 1193-1207 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b10503(査読有)
 13. *R. Kishi, S. Ochi, S. Izumi, A. Makino, T. Nagami, J. Fujiyoshi, N. Matsushita, M. Saito, *M. Nakano, "Diradical Character Tuning for the Third-Order Nonlinear Optical Properties of Quinoidal Oligothiophenes by Introducing Thiophene-S, S-Dioxide Rings", *Chem.–Eur. J.*, **22**(4), 1493-1500 (2016). DOI: 10.1002/chem.201503705(査読有)
 14. S. Sugawara, M. Abe, Y. Fujiwara, M. Wakioka, F. Ozawa, *Y. Yamamoto, "1,8-Disubstituted Xanthyliene-based Remote Carbenes: Photolytic Generation and Isolation of Low-coordinate Palladium(II) Complex," *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2015**, 534–541(2015) doi:10.1002/ejic.201403017(査読有)
 15. S.-i. Fuku-en, K. Furukawa, T. Sasamori, N. Tokitoh, M. Abe, *Y. Yamamoto, "Oxidation of an Allene Compound Bearing 1,8-Dichloroacridene Moieties and Photolysis of the Halogenated Allene Compound for the Generation of Triplet Carbenes," *J. Phys. Org. Chem.*, **28**, 79–87(2015) doi:10.1002/poc.3398(査読有)
 16. Y. Shi, T. Suguri, S. Kojima, *Y. Yamamoto, "7-6-7 Ring-Based Transition-Metal Catalysts for the Transfer Dehydrogenation of Isopropanol", *J. Organometallic Chem.* **799-800**, 7-12(2015). doi: 10.1016/j.jorganchem.2015.08.008(査読有)
 17. N. Maeta, J. Yamamoto, S. Fuku-en, R. Shang, *Y. Yamamoto, "Synthesis of New Dipyrido-Annulated N-Heterocyclic Carbenes with Aryl Substituents", *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* (Dedicated to Prof. F. Ekkehardt Hahn on the Occasion of his 60th birthday), **641**, 2199–2203 (2015). DOI: 10.1002/zaac.201500565(査読有)
 18. S. Ito, T. Nagami, *M. Nakano, "Density Analysis of Intra- and Inter-Molecular Vibronic Couplings Toward Bath Engineering for Singlet Fission", *J. Phys. Chem. Lett.*, **6**(24), 4972-4977 (2015). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.5b02249(査読有)
 19. K. Fukuda, T. Nagami, J. Fujiyoshi, *M. Nakano, "Interplay between Open-Shell Character, Aromaticity, and Second Hyperpolarizabilities in Indenofluorenes", *J. Phys. Chem. A*, **119**(42), 10620-10627 (2015). DOI: 10.1021/acs.jpca.5b08520(査読有)
 20. *M. Nakano, B. Champagne, "Theoretical Design of Open-Shell Singlet Molecular Systems for Nonlinear Optics" *J. Phys. Chem. Lett.*, **6**(16), 3236-3256 (2015). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.5b00956(査読有)
 21. *M. Nakano, B. Champagne, "Diradical character dependence of third-harmonic generation spectra in open-shell singlet systems", *Theoretical Chemistry Accounts*, **134**(3), 23-1-9 (2015). DOI 10.1007/s00214-015-1618-6(査読有)
 22. K. Fukuda, T. Nozawa, H. Yotsuyanagi, M. Ichinohe, A. Sekiguchi *M. Nakano, "Theoretical Study on the Enhancement of the Second Hyperpolarizabilities of Si-, Ge-Disubstituted Quinodimethanes: Synergy Effects of Open-Shell Nature and Intramolecular Charge Transfer", *J. Phys. Chem. C*, **119**(2), 1188-1193 (2015). DOI: 10.1021/jp511521m(査読有)
 23. H. Matsui, K. Fukuda, S. Takamuku, A. Sekiguchi, *M. Nakano, "Theoretical Study on the Relationship between Diradical Character and Second Hyperpolarizabilities of Four-Membered-Ring Diradicals Involving Heavy Main-Group Elements",

- Chem. Eur. J.*, **21**(5), 2157-2164 (2015). DOI: 10.1002/chem.201404592(査読有)
24. S.-i. Fuku-en, J. Yamamoto, S. Kojima, and *Y. Yamamoto, "Synthesis and Application of a New Dipyrido-Annulated N-Heterocyclic Carbene with Phosphorus-Substituents," *Chem. Lett.*, **43**(4), 468-470(2014). (査読有)
 25. A. Katori, Y. Sashihara, A. Iwamoto, S. Kojima, and *Y. Yamamoto, "Highly Diastereoselective Synthesis of Chiral Furans with a Quaternary Carbon Substituent at the 2-Position Using 8-Phenylmenthol as the Chiral Auxiliary," *Chem. Lett.*, **43**(6), 766-768. doi:10.1246/cl.140052 (2014) (査読有)
 26. S. Kojima, N. Banden, *Y. Yamamoto, "A Highly Efficient Cooperative Effect in an Acylation Catalyst Bearing Weak Lewis Base and Lewis Acid Sites," *Chem. Lett.*, **43**, 1266-1268 (2014) doi:10.1246/cl.140343(査読有)
 27. S. Sugawara, T. Kakui, *Y. Yamamoto, "Alternative synthetic route toward octaisopropylporphyrins and structural deformation caused by a meso-butyl group," *J. Porph. Phthalocyanines*, **18**, 975-981(2014) doi:10.1142/S1088424614500801(査読有)
 28. *R. Kishi, Y. Murata, M. Saito, K. Morita, M. Abe, *M. Nakano, "Theoretical Study on Diradical Characters and Nonlinear Optical Properties of 1,3-Diradical Compounds", *J. Phys. Chem. A*, **118**(45), 10837-10848 (2014). DOI: 10.1021/jp508657s(査読有)
 29. H. Fukui, S. Takamuku, T. Yamada, K. Fukuda, T. Takebayashi, T. Shigeta, R. Kishi, B. Champagne, *M. Nakano, "Open-Shell Character and Second Hyperpolarizabilities of One-Dimensional Chromium(II) Chains: Size Dependence and Bond-Length Alternation Effect", *Inorg. Chem.*, **53**(16), 8700-8707 (2014). DOI: 10.1021/ic501334p(査読有)
 30. K. Yoneda, *M. Nakano, K. Fukuda, H. Matsui, S. Takamuku, Y. Hirosaki, T. Kubo, K. Kamada, B. Champagne, "Third-Order Nonlinear Optical Properties of One-Dimensional Open-Shell Molecular Aggregates Composed of Phenalenyl Radicals", *Chem. Eur. J.*, **20**(35), 11129-11136 (2014). DOI: 10.1002/chem.201402197(査読有)
 31. K. Fukuda and *M. Nakano, "Intramolecular Charge Transfer Effects on the Diradical Character and Second Hyperpolarizabilities of Open-Shell Singlet Donor- π -Donor Systems", *J. Phys. Chem. A*, **118**(19), 3463-3471 (2014). DOI: 10.1021/jp412634q(査読有)
 32. A. Kawachi, T. Teranishi, T. Deguchi, *Y. Yamamoto, "Counter-Cation Effect on Reactivity of *o*-(Fluorodimethylsilyl)phenyl Anion," *Heteroatom Chem*, **24** (1), 53-57 (2013). DOI: 10.1002/hc.21062(査読有)
 33. *K. Kamada, S. Fuku-en, S. Minamide, K. Ohta, R. Kishi, M. Nakano, H. Matsuzaki, H. Okamoto, H. Higashikawa, K. Inoue, S. Kojima, *Y. Yamamoto, "Impact of Diradical Character on Two-Photon Absorption: Bis(acridine) Dimers Synthesized from an Allenic Precursor," *J. Am. Chem. Soc.*, **135** (1), 232-241 (2013). dx.doi.org/10.1021/ja308396a(査読有)
 34. T. Yamaguchi, *Y. Yamamoto, "Substituent Effects on the Structure of Hexacoordinate Carbon Bearing Two Thioxanthene Ligands," *Pure and Applied Chemistry*, **85** (4), 671-682 (2013). dx.doi.org/10.1351/PAC-CON-12-11-05(査読有)
 35. Y. Shi, S. Kojima, *Y. Yamamoto, "Synthesis and Characterization of Novel 7-6-7 Ring Based PCP Pincer Rhodium Complexes," *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, **188** (1-3), 116-120 (2013). DOI: 10.1080/10426507.2012.743137(査読有)
 36. Y. Shi, T. Suguri, C. Dohi, H. Yamada, S. Kojima, and *Y. Yamamoto, "Highly Active Catalysts for the Transfer Dehydrogenation of Alkanes: Synthesis and Application of Novel 7-6-7 Rings Based Pincer Iridium Complexes," *Chemistry – A European Journal*, **19**(32), 10672-10689 (2013). DOI: 10.1002/chem.201203108(査読有)
 37. S. Hiramatsu, S. Sugawara, S. Kojima, and *Y. Yamamoto, "Synthesis of the most anti-aromatic 16pi porphyrin: an octaethylporphyrin zinc(II) complex with no meso-substituents," *J. Porph. Phthalocyanines*, **17**(12), 1183-1187 (2013). DOI: 10.1142/S1088424613501009(査読有)
 38. A. Kawachi, H. Morisaki, T. Hirofujii, and *Y. Yamamoto, "Synthesis of Silicon-Functionalized Dibenzosilaborins by Intramolecular B-H/C-H Dehydrogenative Cyclization and Their Tunable Photophysical and Chemical Properties by Silyl Groups," *Chemistry – A European Journal*, **19**(40), 13294-13298 (2013). DOI: 10.1002/chem.201301330(査読有)
 39. S.-i. Fuku-en, J. Yamamoto, M. Minoura, S. Kojima, and *Y. Yamamoto, "Synthesis of New Dipyrido-Annulated N-Heterocyclic Carbenes with Ortho-Substituents," *Inorg. Chem.*, **52**(20), 11700-11702 (2013). DOI: 10.1021/ic402301u(査読有)
 40. *R. Kishi, M. Dennis, K. Fukuda, Y. Murata, K. Morita, H. Uenaka, and *M. Nakano, "Theoretical Study on the Electronic Structure and Third-Order Nonlinear Optical Properties of Open-Shell Quinoidal Oligothiophenes", *J. Phys. Chem. C*, **117**(41), 21498-21508 (2013). DOI: 10.1021/jp407482h(査読有)
 41. H. Matsui, K. Fukuda, Y. Hirosaki, S. Takamuku, B. Champagne, *M. Nakano, "Theoretical study on the diradical characters and third-order nonlinear optical properties of cyclic thiazyl diradical compounds", *Chem. Phys. Lett.*, **585**, 112-116 (2013). DOI: 10.1016/j.cplett.2013.08.087(査読有)
 42. K. Okuno, *Y. Shigeta, R. Kishi, and *M. Nakano, "Photochromic Switching of Diradical Character: Design of Efficient Nonlinear Optical Switches", *J. Phys. Chem. Lett.*, **4**(15), 2418-2422 (2013). DOI: 10.1021/jz401228c(査読有)
 43. *M. Nakano, and B. Champagne, "Diradical character dependences of the first and

- second hyperpolarizabilities of asymmetric open-shell singlet systems”, *J. Chem. Phys.*, **138**(24), 244306-1-13 (2013). DOI: 10.1063/1.4810860(査読有)
44. M. de Wergifosse, F. Wautelet, *B. Champagne, R. Kishi, K. Fukuda, H. Matsui, M. Nakano, “Challenging Compounds for Calculating Hyperpolarizabilities: p-Quinodimethane Derivatives”, *J. Phys. Chem. A.*, **117**(22), 4709-4715 (2013). DOI: 10.1021/jp403163z(査読有)
 45. *S. Muhammad, K. Fukuda, T. Minami, R. Kishi, Y. Shigeta, *M. Nakano, “Interplay between the Diradical Character and Third-Order Nonlinear Optical Properties in Fullerene Systems,” *Chem. Eur. J.*, **19** (5), 1677-1685 (2013). DOI: 10.1002/chem.201203463(査読有)
 46. S. Sugawara, Y. Hirata, S. Kojima, *Y. Yamamoto, E. Miyazaki, K. Takimiya, S. Matsukawa, D. Hashizume, J. Mack, *N. Kobayashi, Z. Fu, *K. M. Kadish, Y. M. Sung, K. S. Kim, *D. Kim, “Synthesis, Characterization and Spectroscopic Analysis of Antiaromatic Benzofused Metalloporphyrin Species,” *Chemistry – A European Journal*, **18**(12), 3566-3581 (2012). (査読有)
 47. A. Kawachi, H. Morisaki, N. Nishioka, *Y. Yamamoto, “Intramolecular H-Ar Ligand Exchange between Silicon and Boron: Functionality Transfer of Si-H to B-H,” *Chemistry – An Asian Journal*, **7**(3), 546-553 (2012). DOI : 10.1002/asia.201100678(査読有)
 48. S. Sugawara, S. Kojima, *Y. Yamamoto, “Synthesis of New Cyclic Aromatic Carbene Ligands Bearing Remote Amino Groups and Their Palladium (II) Complexes,” *Chem. Commun.*, **48**(78), 9735-9737 (2012). DOI: 10.1039/C2CC33510G (査読有)
 49. *J. Ohshita, R. Fujita, D. Tanaka, Y. Ooyama, N. Kobayashi, H. Higashimura, Y. Yamamoto, “Synthesis and Optical Properties of Dithienostiboles,” *Chem. Lett.*, **41**(9), 1002-1003 (2012). DOI:10.1246/cl.2012.1002(査読有)
 50. X.-D. Jiang, S. Matsukawa, S. Kojima, *Y. Yamamoto, “Synthesis and Characterization of Antiapicophilic Arsoranones and Related Compounds,” *Inorg. Chem.*, **51**(20), 10996-11006 (2012). DOI: 10.1021/ic3014893(査読有)
 51. K. Yoneda, *M. Nakano, K. Fukuda, B. Champagne, “The Odd Electron Density Is the Guide toward Achieving Organic Molecules with Gigantic Third-Order Nonlinear Optical Responses,” *J. Phys. Chem. Lett.*, **3** (22), 3338-3342 (2012). DOI: 10.1021/jz301573j(査読有)
- [学会発表](計 418 件)
1. Yohsuke Yamamoto, Results from Joint Researches: Synthesis and Applications of Stable Hypervalent S, Se and N Radicals, 2nd International Symposium on Stimuli Responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules, 2017 年 3 月 6-7 日, 広島県東広島市
 2. Yohsuke Yamamoto, Preparation of Hypervalent Group-16 Radicals and Their Application in Organic-Radical Batteries (Plenary lecture), the 13th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (ICCST-13), 23-27 May, 2016 Gifu
 3. 山本陽介, 環状芳香族リモートカルベン配位子の合成と応用, 文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究「感応性化学種が拓く新物質科学」第 6 回公開シンポジウム, 2016 年 5 月 20-21 日、広島県東広島市
 4. 山本陽介, 感応性化学種の領域概要と共同研究の一例 ジラジカル性を示す窒素ラジカルカチオン二量体, 文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究「感応性化学種が拓く新物質科学」第 5 回公開シンポジウム(合同開催:新学術領域研究「元素ブロック」第 8 回公開シンポジウム), 2016 年 5 月 19 日、広島県東広島市
 5. Sohta Saito, Naoto Maeta, Rong Shang, Yohsuke Yamamoto, Novel Boron-ligated and Annulated N-heterocyclic Carbene-coordinated Transition Metal Complexes, The 3rd International Symposium for Young Chemists on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules 2016 年 3 月 9-10 日, 名古屋市
 6. Yohsuke Yamamoto, Masato Takeshita, Kaoko Sato, Junya Nakatsuji, Akihiro Kurosaki, Masayoshi Nakano, Ryohei Kishi, Ko Furukawa, Kenji Kamada, Hypervalent pentacoordinated nitrogen radical cations: Synthesis, structure, and application to singlet diradicaloid, (invited lecture, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015, 15-20, Dec. 2015, Honolulu, U.S.A.(invited lecture)
 7. Y. Yamamoto, Synthesis and Properties of New Singlet Carbenes and Singlet Diradicaloids, International Conference about Polymers and Advanced Materials-2015, Oct. 18-22, 2015, Oaxaca, Mexico (invited lecture)
 8. M. Nakano, Nonlinear optical properties of open-shell molecular systems, 250th American Chemical Society National Meeting & Exposition Division of Physical Chemistry, "From Diradicals & Polyradicals to Functionalized Materials: Theory Meets Experiment",

- 16-20, Aug. 2015, Boston, USA (Invited talk)
9. Y. Yamamoto, Y. Imada, T. Kukita, H. Nakano, K. Furukawa, R. Kishi, M. Nakano, H. Maruyama, M. Nakamoto, A. Sekiguchi, Synthesis and Properties of Hypervalent Sulfur Radicals, The 14th International Symposium on Inorganic Ring Systems (IRIS-14), 26-31, Jul., 2015, レーゲンスブルグ, Germany
 10. 山本陽介, 超原子価 5 配位ラジカルカチオン化合物の合成とジラジカル性を示す二量体の構造・性質, 文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究「感応性化学種が拓く新物質科学」第 4 回公開シンポジウム, 2015 年 5 月 22-23 日, 京都府宇治市
 11. M. Nakano, K. Yoneda, K. Fukuda, H. Matsui, S. Takamuku, Y. Hirosaki, R. Kishi, B. Champagne, Nonlinear Optical Properties of Open-Shell Molecular Systems: Open-Shell Singlet Molecules and Molecular Aggregates, 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, 5-10, Oct. 2014, Santiago, Chile (Invited talk)
 12. 山本陽介, 超原子価硫黄化合物の性質と物性、および 2 光子吸収化合物の生体応用に向けて、生体反応系における感応性化学種シンポジウム, 2014 年 10 月 13 日, 東京都江戸川区
 13. 今田康公・山本陽介, カルボニル基を有する新規超原子価硫黄アニオンの合成と電池への応用, 文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究「感応性化学種が拓く新物質科学」第 3 回公開シンポジウム, 2014 年 6 月 16-17 日, 茨城県つくば市
 14. 山本陽介, 新規カルベンの合成検討とその展開第 30 回有機合成化学セミナー, 2013 年 9 月 17-19 日, 岡山県倉敷市)
 15. 山本陽介, 超原子価炭素・ホウ素化合物の合成とその後の展開, 有機合成夏期セミナー「明日の有機合成化学」, 2013 年 9 月 2-3 日, 大阪市 (招待講演)
 16. Yohsuke Yamamoto, Development of a New Tridentate Ligand and Application to the Synthesis of an Isolable Hypervalent Sulfur Radicals (9-S-3), The 1st International Symposium on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules, 26-27, Mar. 2013, Hiroshima
 17. 今田康公, 新規三座配位子の開発と超原子価硫黄ラジカルの合成検討, 第 39 回有機典型元素化学討論会, 2012 年 12 月 6-8 日, 岩手県盛岡市
 18. 山本 陽介, 感応性高配位典型元素化合物の創製と反応, 文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究「感応性化学種が拓く新物質科学」第 1 回公開シンポジウム, 2012 年 9 月 29 日, 京都府宇治市
- 〔図書〕(計 4 件)
1. M. Nakano, Excitation Energies and Properties of Open-Shell Singlet Molecules, Springer, 2014, 総ページ: 121 頁
 2. 岸 亮平, 中野 雅由, 4 章 金属錯体の構造, 物性, および機能発現, 4-3 線形および非線形応答理論と時間依存および無依存応答量, 錯体化学選書 10 金属錯体の量子・計算化学 (山口 兆, 榊 茂好, 増田 秀樹 編著), 三共出版, 2014, 総ページ: 529 頁 (p363-p383)
- 出願状況 (計 1 件)
- 名称: 蓄電デバイス、化合物および化合物の製造方法
 発明者: 山本陽介、今田康公、中野秀之、向井和彦
 権利者: 広島大学
 種類: 特許
 番号: 特願 2014-159856
 出願年月日: 2014 年 8 月 5 日
 国内外の別: 国内
- 〔その他〕
 ホームページ等
<http://www.strecs.jp/>
<http://home.hiroshima-u.ac.jp/hetero2/>
<http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/nakano/index.html>
6. 研究組織
- (1) 研究代表者
 山本 陽介 (YAMAMOTO YOHUSUKE)
 広島大学・大学院理学研究科・教授
 研究者番号: 50158317
 - (2) 研究分担者
 中野 雅由 (NAKANO MASAYOSHI)
 大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授
 研究者番号: 80252568
 - (3) 連携研究者
 小島 聡志 (KOJIMA SATOSHI)
 広島大学・大学院理学研究科・准教授 (退職)
 研究者番号: 70215242
- 岸 亮平 (KISHI RYOHEI)
 大阪大学・大学院基礎工学研究科・助教
 研究者番号: 90452408