研究成果報告書 科学研究費助成事業



4 月 1 4 日現在 今和 3 年

機関番号: 24402
研究種目: 基盤研究(B)(一般)
研究期間: 2018 ~ 2020
課題番号: 18日01955
研究課題名(和文)SQUID磁束計ヘマイクロ波偏光を導入することによる円偏光キラルESRの観測
研究理题名(英文)Chiral ECD apactroscopy with sircularly palarized microways on a SOULD
m充昧遗石(英文)Chinal Esk spectroscopy with circularly poralized incrowave on a source magnetometer
研究代表者
塩見 大輔(Shiomi, Daisuke)
大阪市立大学・大学院理学研究科・准教授
研究者番号:4 0 2 6 0 7 9 9
父 何 决 正 額 (

研究成果の概要(和文):ESRで用いられるマイクロ波は,一般に直線偏波であった.これを左右円偏波にする ことで,磁性体のキラリティーをESRで直接評価できる可能性がある.本研究では,汎用のSQUID磁束計に円偏波 を導入して,縦磁化の変化量を検出することで円偏波ESRを測定する装置系を開発した.動作周波数をQ/Kaバン ドまたはVバンドとした測定系を設計・製作した.アンデナ端から放射される電磁波がら求めた左右円偏波の振 幅比は0.9程度だった.しかし,導波管内に磁性体試料を入れて測定した磁化から偏波比を求めると0.4/0.6程度 だった.低偏波度の原因として,高次モードの混入や,波長に対する試料の相対的大きさが考えられる.

研究成果の学術的意義や社会的意義 ESR(電子スピン共鳴)は,磁性体の評価手段として強力な方法である.これに円偏波の電磁波を使えるように なれば,これまで「ESRの眼」から隠されていた構造キラリティーに関する情報が得られる可能性がある.円偏 波を使ってESRを検出するには,これまで技術的な困難があったが,定常的な縦磁化を検出するという斬新な方 法をとることでこれを克服することに挑戦した.円偏波を照射しつつ縦磁化を検出できる装置系を設計し製作し た.完成した装置で電磁波偏波の形を評価した結果,大きく「だ円形」に歪んでいることがわかった.この原因 として,装置内部での偏波の反射や装置の歪み,或いは試料の大きさと波長との関係が考えられる.

研究成果の概要(英文):A novel spectroscopic method and instrumentation of ESR have been developed focusing on chiral magnetic systems. The measurement system is based on the static longitudinal magnetization detected on a conventional SQUID magnetometer, to which a circularly polarized microwave is introduced with a cylindrical waveguide. The waveguide suitable for the circularly polarized microwave in the V- or Q/Ka-band was designed on the basis of electromagnetic field simulations. With these system, ESR signals from an achiral organic radical were observed at cryogenic temperatures. It has been found from the analysis of the ESR signals that the irradiated microwave was contaminated with linearly polarized wave; the amplitude ratio of left- and right-handed polarized waves were 0.3/0.7 (V-band) and 0.4/0.6 (Q/Ka-band). Possible causes of the elliptic contamination are ascribed to the reflection or the higher-order modes of the polarized microwave and a volume effect inherent in the sample.

研究分野:物理化学·磁気化学

キーワード: ESR 円偏波 SQUID キラリティー キラル磁性体 マイクロ波

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等に ついては、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

キラリティーをもつ磁性体は,自然光学活性(旋光性)と同時 に、磁化に由来するファラデー効果を示す. さらに、これら2 つの効果の単純な足し合わせだけでなく、不斉磁気二色性ま たは磁気キラル効果と呼ばれる新しい磁気光学効果をも示す ことが期待される.磁気キラル効果は、これまでおもに、物質 の光学的性質の面から調べられてきた.本研究では,磁気キラ ル効果を調べるための新しい変数軸を提案する. すなわち, ESR (電子スピン共鳴) に用いるマイクロ波を円偏波(円偏光) 化することで、キラリティーに関する情報を磁気分光学的に 調べられる新手法の開拓につなげる.これまでに行なってき た研究課題(基盤研究 B, 平成 27~29 年度)では, 汎用の SQUID 磁束計に円偏波を導入して、磁気共鳴に伴う縦磁化の 変化量ΔMz を静的に検出する(図 1)ことで円偏波 ESR を測 定できる装置系の開発を試みてきた.この課題で行なった電 磁場シミュレーションの結果より,円筒導波管の一部にコー ン状構造をつけると, 偏波比(|pLR|: 左右円偏波の交流電場ま たは磁場振幅比)が0または∞(純粋な左右円偏波)になる領 域が管内で増大することがわかっていた. そのため, 導波管の 上端にコーン状のホーンアンテナをつけ、測定はすべて V バ ンド(69 GHz帯)で行なっていた.本研究では,静的な縦磁 化検出により円偏波 ESR を観測するという基本 方針は保持しつつ,

管内波長と管内モードの純 度を見直すことにし, 導波管にはコーン状構造 を持たせず,かつ,より長波長のQバンド(34 アンテナ GHz 帯)で動作する円筒導波管・励振系を新た に設計・試作することを計画した.

2. 研究の目的

Q バンド(34 GHz 帯)で動作する円筒導波管・ 励振系を設計・製作し、それを用いて、アキラル な有機ラジカルを基準試料として磁化を測定す る. その磁化データから導波管中の試料位置で の偏波比の解析を行なうことにした.磁性体試 料がない状態で,導波管内の試料位置での電場・ 磁場強度や偏波状態を直読することは極めて困 難なため、アンテナの端(発振器からポーララ イザーを経て偏波化されたマイクロ波が通過す る)から自由空間に照射される電磁波を測定し 管内の偏波状態を間接的に評価することにし た. ベクトルネットワークアナライザーに励振 系を接続して,アンテナ端近傍の空間での電場・ 磁場強度の分布から偏波状態を調べた.従来の Vバンド(69 GHz帯)での励振系と比較して, 本系 (Q バンド) の円筒導波管・励振系で, 円偏 波状態がどの程度向上するか評価した.

3. 研究の方法

円筒導波管を兼ねた細径クライオスタットを製作した.図2に示すように、クライオスタット の外形と外径(O.D.)は、現有のSQUID磁束計 に接続できる管径に合わせて、前回のVバンド 励振系と同様のものを設計した.導波管の内径 は、Qバンド(34 GHz帯)のTE₁₁モードに合わ せて、6.35 mm(1/4 in)とした.管の材質は、磁 性不純物の含有率が低い管材が入手しやすいこ とと、熱伝導率が低いことから、純チタン(表面 研磨されたもの)を採用した.SQUID磁束計の 上下駆動機構(トランスポート)と接続する部



図 1. 縦磁化検出による円偏 波 ESR 法の原理. 共鳴条件 を満たすマイクロ波の照射 により Zeeman 副準位の分布 と縦磁化が変化する.



図 2. 円筒導波管. 外形は前回の基盤研究 B(平成 27~29 年度)で製作した V バンド 用のものとほぼ同じである. 波長の変更に 応じて, アンテナ形状と管の内径を変更し ている.



図3. マイクロ波励振源と導波管の構成. (a)縦磁化検出 ESR(静磁化の変化)を測定する場合. (b)アンテナ端から自由空間に放射される電磁波強度の空間分布をベクトルネットワーク アナライザー(VNA)で測定する場合. ブロック図中で方向性カップラーとアッテネーター のコネクター部に各々挿入したアイソレーターは省略している.

分は、ステンレス(SUS304)を用いて製作した。円筒導波管内にアキラルな基準試料を挿入し て導波管ごと磁化を測定し、マイクロ波の照射のON/OFFによる静磁化の変化量を測定する。縦 磁化検出 ESR(静磁化の変化)を測定する場合のマイクロ波源と導波管の構成を図3(a)に示す。 また、マイクロ波の発振系にベクトルネットワークアナライザー(VNA)を接続し、アンテナ端 近傍での電磁場強度を計測する(図3(b))。その結果から、管端近傍での円偏波度を評価する。

4. 研究成果

(1) 基準試料として用いたラジカル試料を図 4 に示す. このラジカル (ピリジン置換のニトロ ニルニトロキシド PyNN) は既知物質^①であり,結晶中で反転中心と映進面をもつアキラルな構 造をもつことが知られている. PyNN の無秩序配向微結晶試料を用いて測定した磁化曲線(磁化 の磁場依存性; T=1.9 K) は,ほぼ Brillouin 関数 (S=1/2) に従った. 結晶中の分子間に弱い強 磁性交換相互作用が働くことが知られており,測定で得られた磁化曲線はその結果と矛盾しな い.次に、マイクロ波を照射しながら磁化 M を測定すると、ESR の共鳴条件を満足する磁場領 域(静磁場 B=1.21 T 付近) で磁化の減少が見られた. ポーラライザーを経由しない場合を"直 線偏波"とし、ポーラライザーを

順・逆方向にセットした場合を それぞれ"L円偏波"・"R円偏 波"と呼ぶことにした.導波管内 の偏波状態をLR基底で考え,静 磁化の変化量が偏波状態だけで 決まっていると仮定すると,磁 化の減少量から偏波比 $|\rho_{LR}|$ が求 められる."L円偏波"と"R円 偏波"の偏波比はそれぞれ



図 4. アキラルな基準試料とし て用いたニトロニルニトロキ シドラジカル PyNN.



図 5. マイクロ波照射による静磁化の変化(T=1.9 K).

0.47/0.53, 0.45/0.55 であった. これらの値は, コーン状構造を持つ V バンドでの偏波比(0.3/0.7 程度)と較べても著しく劣化している.

(2) アンテナ端近傍での電磁場強度を計測し、その結果から管端近傍での円偏波度を評価した. 直交する二つの方向(H,V)で計測した電場強度(振幅) $|E_{H}|,|E_{V}|$ と相対位相 δ から Stokes パラメ ーター $g_{0} \sim g_{3}$ を求め、それらから電場 Eと磁場 Bについて偏波比 $|\rho_{LR}|$ を算出した(式(1)~(6)).

 $g_0 = |E_{\rm H}|^2 + |E_{\rm V}|^2 \tag{1}$

$$g_1 = |E_{\rm H}|^2 - |E_{\rm V}|^2 \tag{2}$$

$$g_2 = 2|E_{\rm H}||E_{\rm V}|\cos\delta \tag{3}$$

$$g_3 = 2|E_{\rm H}||E_{\rm V}|\sin\delta \tag{4}$$

$$|\rho_{\rm LR}|^2 = \frac{|E_{\rm R}|^2}{|E_{\rm L}|^2} = \frac{g_0 - g_3}{g_0 + g_3}$$
(5)

$$|E_{\rm R}|:|E_{\rm L}| = |B_{\rm R}|:|B_{\rm L}| = \frac{|\rho_{\rm LR}|}{1+|\rho_{\rm LR}|} = \frac{1}{1+|\rho_{\rm LR}|}$$
(6)

管軸を中心として±50 mm の範囲の 2 次元面内でプローブアンテナを走査して得られた結果を 図 6 に示す.プローブのセッティングの都合により,走査中心は菅軸から 3 mm 程度ずれている が,菅軸の延長軸上での偏波比は 0.096/0.904 程度とかなり良好であることがわかった. 試料(磁 性体)がない場合には,少なくとも菅軸上では事前のシミュレーションで予想されていた程度の 良好な偏波比が保たれていることになる.これに対して,円筒導波管内に試料を挿入して,試料 の磁化(の変化量)から求めた偏波比(0.47/0.53 程度)は,Vバンドでの偏波比(0.3/0.7 程度) よりもさらに劣化した.この原因としては,有限の体積・直径の試料を導波管内に完裕させたこ とにより,偏波比の空間分布の影響がより長波長の動作により顕著に現れた,あるいは,導波管 の軸対称からのずれの影響をより強く受けたことが考えられる.



図6.アンテナ端近傍での電場強度の空間分布から求めた偏波比|p_{LR}|.

<引用文献> ①K. Awaga, T. Inabe, Y. Maruyama, *Chem. Phys. Lett.*, **1992**, *190*, 349.

5.主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件(うち査読付論文 12件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 0件) 4.巻 1. 著者名 Yokoyama Naoki, Tanaka Nobuaki, Fujimoto Natsumi, Tanaka Rika, Suzuki Shuichi, Shiomi Daisuke, 16 Sato Kazunobu, Takui Takeji, Kozaki Masatoshi, Okada Keiji 5.発行年 2 . 論文標題 Syntheses and Properties of (Nitronyl nitroxide) substituted Tri phenylamine ortho 2021年 Bridged by Two Oxygen and Sulfur Atoms 3. 雑誌名 6.最初と最後の頁 Chemistry An Asian Journal 72~79 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 10.1002/asia.202001227 右 オープンアクセス 国際共著 オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1. 著者名 4.巻 Tanimoto Ryu, Suzuki Shuichi, Kozaki Masatoshi, Kanzaki Yuki, Shiomi Daisuke, Sato Kazunobu, 5 Takui Takeji, Tanaka Rika, Okada Keiji 5 . 発行年 2.論文標題 Magnetic Properties of Metal Clusters Coordinated with (Nitronyl Nitroxide) Substituted 2020年 Amidinate Ligands 3.雑誌名 6.最初と最後の頁 ChemistrySelect $11170 \sim 11176$ 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 10.1002/slct.202002927 有 オープンアクセス 国際共著 オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1 著者名 4.巻 Nagata Atsuki, Hiraoka Shinsuke, Suzuki Shuichi, Kozaki Masatoshi, Shiomi Daisuke, Sato 26 Kazunobu, Takui Takeji, Tanaka Rika, Okada Keiji 2. 論文標題 5.発行年 Redox Induced Modulation of Exchange Interaction in a High Spin Ground State 2020年 Diradical/Triradical System 3.雑誌名 6.最初と最後の頁 Chemistry A European Journal 3166 ~ 3172 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 10.1002/chem.201905465 有 オープンアクセス 国際共著 オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 4.巻 Zaytseva Elena, Shiomi Daisuke, Ten Yury, Gatilov Yuri V., Lomanovich Alyona, Stass Dmitri, 124 Bogomyakov Artem, Yu Aixia, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Bagryanskaya Elena, Mazhukin Dmitrii 2. 論文標題 5.発行年 Magnetic Properties of -Conjugated Hybrid Phenoxyl?Nitroxide Radicals with Extended 2020年 -Spin Delocalization 3. 雑誌名 6.最初と最後の頁 The Journal of Physical Chemistry A $2416 \sim 2426$ 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 有 10.1021/acs.jpca.9b11856 オープンアクセス 国際共著 オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 該当する

1.著者名 Sato Kazunobu、Hirao Rei、Timofeev Ivan、Krumkacheva Olesya、Zaytseva Elena、Rogozhnikova Olga、Tormyshev Victor M.、Trukhin Dmitry、Bagryanskaya Elena、Gutmann Torsten、Klimavicius Vytautas、Buntkowsky Gerd、Sugisaki Kenji、Nakazawa Shigeaki、Matsuoka Hideto、Toyota Kazuo、 Shiomi Daisuke、Takui Takeji	4.巻 123
2 . 論文標題 Trityl-Aryl-Nitroxide-Based Genuinely g-Engineered Biradicals, As Studied by Dynamic Nuclear Polarization, Multifrequency ESR/ENDOR, Arbitrary Wave Generator Pulse Microwave Waveform Spectroscopy, and Quantum Chemical Calculations	5 . 発行年 2019年
3.雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6 . 最初と最後の頁 7507 ~ 7517
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b07169	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1.著者名 Sugisaki Kenji、Nakazawa Shigeaki、Toyota Kazuo、Sato Kazunobu、Shiomi Daisuke、Takui Takeji	4.巻 21
2 . 論文標題 Quantum chemistry on quantum computers: quantum simulations of the time evolution of wave functions under the S2 operator and determination of the spin quantum number S	5 . 発行年 2019年
3.雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6 . 最初と最後の頁 15356~15361
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP02546D	査読の有無 有
	person private in a starting
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共者
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共者
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito、Horii Koki、Shiomi Daisuke、Sato Kazunobu、Takui Takeji、Yasuda Makoto	国際共者
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito、Horii Koki、Shiomi Daisuke、Sato Kazunobu、Takui Takeji、Yasuda Makoto 2.論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene	国際共者 - 4.巻 141 5.発行年 2019年
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito、Horii Koki、Shiomi Daisuke、Sato Kazunobu、Takui Takeji、Yasuda Makoto 2.論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3.雑誌名 Journal of the American Chemical Society	国際共者 - 4.巻 141 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 10165~10170
 オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito、Horii Koki、Shiomi Daisuke、Sato Kazunobu、Takui Takeji、Yasuda Makoto 2.論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3.雑誌名 Journal of the American Chemical Society 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b04080 	国際共者 - 4.巻 141 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 10165~10170 査読の有無 有
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito、Horii Koki、Shiomi Daisuke、Sato Kazunobu、Takui Takeji、Yasuda Makoto 2.論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3.雑誌名 Journal of the American Chemical Society 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b04080 オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共者 - 4 . 巻 141 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 10165~10170 査読の有無 有 国際共著 -
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito, Horii Koki, Shiomi Daisuke, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Yasuda Makoto 2.論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3.雑誌名 Journal of the American Chemical Society 掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b04080 オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共者 - 4 . 巻 141 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 10165~10170 査読の有無 有 国際共著 -
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito, Horii Koki, Shiomi Daisuke, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Yasuda Makoto 2.論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3.雑誌名 Journal of the American Chemical Society 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b04080 オープンアクセス オープンアクセスが困難 1.著者名 Tahara Takuma, Suzuki Shuichi, Kozaki Masatoshi, Shiomi Daisuke, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Miyake Yota, Hosokoshi Yuko, Nojiri Hiroyuki, Okada Keiji	国際共者 - 4 . 巻 141 5 . 発行年 2019年 6 . 最初と最後の頁 10165~10170 査読の有無 有 国際共著 - 4 . 巻 25
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito, Horii Koki, Shiomi Daisuke, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Yasuda Makoto 2.論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3.雑誌名 Journal of the American Chemical Society 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b04080 オープンアクセス オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Tahara Takuma, Suzuki Shuichi, Kozaki Masatoshi, Shiomi Daisuke, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Miyake Yota, Hosokoshi Yuko, Nojiri Hiroyuki, Okada Keiji 2.論文標題 Triplet Diradical Cation Salts Consisting of the Phenothiazine Radical Cation and a Nitronyl Nitroxide	国際共者 - 4.巻 - 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 10165~10170 査読の有無 有 国際共著 - 4.巻 25 5.発行年 2019年
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1.著者名 Konishi Akihito, Horii Koki, Shiomi Daisuke, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Yasuda Makoto 2.論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society 掲載論文のDOI (デジタルオプジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b04080 オープンアクセス オープンアクセス オープンアクセス パロシープンアクセス 1.著者名 Tahara Takuma, Suzuki Shuichi, Kozaki Masatoshi, Shiomi Daisuke, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Miyake Yota, Hosokoshi Yuko, Nojiri Hiroyuki, Okada Keiji 2.論文標題 Triplet Diradical Cation Salts Consisting of the Phenothiazine Radical Cation and a Nitronyl Nitroxide 3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	国際共者 - 4.巻 - 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 10165~10170 査読の有無 有 国際共著 - 4.巻 - 25 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 7201~7209 7201~7209
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1. 著者名 Konishi Akihito, Horii Koki, Shiomi Daisuke, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Yasuda Makoto 2. 論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b04080 オープンアクセス オープンアクセス メープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1. 著者名 Tahara Takuma, Suzuki Shuichi, Kozaki Masatoshi, Shiomi Daisuke, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Miyake Yota, Hosokoshi Yuko, Nojiri Hiroyuki, Okada Keiji 2. 論文標題 Triplet Diradical Cation Salts Consisting of the Phenothiazine Radical Cation and a Nitronyl Nitroxide 3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	国際共者 - 4.巻 141 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 10165~10170 査読の有無 有 国際共著 - 4.巻 25 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 7201~7209
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1. 著者名 Konishi Akihito, Horii Koki, Shiomi Daisuke, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Yasuda Makoto 2. 論文標題 Open-Shell and Antiaromatic Character Induced by the Highly Symmetric Geometry of the Planar Heptalene Structure: Synthesis and Characterization of a Nonalternant Isomer of Bisanthene 3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society 掲載論☆のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b04080 オープンアクセス オープンアクセス ボープンアクセス、オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 1. 著者名 Tahara Takuma, Suzuki Shuichi, Kozaki Masatoshi, Shiomi Daisuke, Sugisaki Kenji, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Miyake Yota, Hosokoshi Yuko, Nojiri Hiroyuki, Okada Keiji 2. 論文標題 Triplet Diradical Cation Salts Consisting of the Phenothiazine Radical Cation and a Nitronyl Nitroxide 3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal 掲載論☆のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201900513	国際共者 - 4.巻 - 141 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 10165~10170 10165~10170 査読の有無 有 国際共著 - 4.巻 - 25 5.発行年 2019年 6.最初と最後の頁 7201~7209 1010 査読の有無 有 重読の有無 有

1.著者名 Tsujimoto Haruki、Suzuki Shuichi、Kozaki Masatoshi、Shiomi Daisuke、Sato Kazunobu、Takui Takeji、Okada Keiji	4.巻 ¹⁴
2.論文標題 Synthesis and Magnetic Properties of (Pyrrolidin 1 oxyl)?(Nitronyl Nitroxide)/(Iminonitroxide) Dyads	5 . 発行年 2019年
3.雑誌名 Chemistry – An Asian Journal	6.最初と最後の頁 1801~1806
「掲載会立のDOL(デジタルオブジェクト湾別子)	本語の右無
10.1002/asia.201801615	
│ オープンアクセス │ オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著
1.著者名 Nishinaga Tohru、Kanzaki Yuki、Shiomi Daisuke、Matsuda Kenji、Suzuki Shuichi、Okada Keiji	4.巻 ²⁴
2.論文標題 Radical Cation -Dimers of Conjugated Oligomers as Molecular Wires: An Analysis Based on Nitronyl Nitroxide Spin Labels	5 . 発行年 2018年
3.雑誌名 Chemistry – A European Journal	6 . 最初と最後の頁 11717~11728
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201801712	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1.著者名 Kanzaki Yuki、Mitani Satoshi、Shiomi Daisuke、Morita Yasushi、Takui Takeji、Sato Kazunobu	4.巻 10
2.論文標題 Microscopic Behavior of Active Materials Inside a TCNQ-Based Lithium-Ion Rechargeable Battery by in Situ 2D ESR Measurements	5 . 発行年 2018年
3 . 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6 . 最初と最後の頁 43631 ~ 43640
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.8b14967	│ 査読の有無 有 月
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1.著者名 Yamane Takeshi、Sugisaki Kenji、Matsuoka Hideto、Sato Kazunobu、Toyota Kazuo、Shiomi Daisuke、 Takui Takeji	4.巻 47
2.論文標題 ESR analyses of picket fence MnII and 6th ligand coordinated FeIII porphyrins (S = 5/2) and a Coll(hfac) complex (S = 3/2) with sizable ZFS parameters revisited: a full spin Hamiltonian approach and quantum chemical calculations	5 . 発行年 2018年
3.雑誌名 Dalton Transactions	6 . 最初と最後の頁 16429~16444
19車Xim又VJUUI(テンツルタノンエクト諏別子) 10.1039/c8dt02988a	^旦 ஸの ¹ 月無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著

〔学会発表〕 計8件(うち招待講演 0件/うち国際学会 6件)

1.発表者名

Takeshi Yamane, Kenji Sugisaki, Kazunobu Sato, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Takeji Takui

2.発表標題

ESR analyses of high-spin pentacoordinated cobalt(II) complexes revisited: Exact geff-gtrue relationships and quantum chemical calculations

3.学会等名

The 13th Japanese-Russian Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"(国際学会)

4.発表年

2019年

1.発表者名 塩見大輔,佐藤和信,工位武治

2.発表標題 SQUID磁束計での静磁化検出によるQ-バンド円偏波ESR

3.学会等名
 第58回電子スピンサイエンス学会年会

4.発表年 2019年

1.発表者名

Takeshi Yamane, Kenji Sugisaki, Kazunobu Sato, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Takeji Takui

2.発表標題

ESR Analyses of Picket Fence MnII and 6th Ligand Coordinate FellI Porpyrins and a Coll Complex with Sizable ZFS Parameters Revisited

3 . 学会等名

43rd International Conference on Coordination Chemistry (ICCC2018)(国際学会)

4. 発表年 2018年

1.発表者名

Kazunobu Sato, Satoru Yamamoto, Taiki Shibata, Rei Hirao, Keigo Tanimoto, Kenji Sugisaki, Shigeaki Nakazawa, Elham Hosseini, Koji Maruyama, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Konstantin Ivanov, Yasushi Morita, and Takeji Takui

2.発表標題

Molecular Spin Quantum Computing by Arbitrary Microwave Excitation Technology for Optimal Quantum Control

3 . 学会等名

The 16th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2018)(国際学会)

4.発表年

2018年

1.発表者名

Rei Hirao, Satoru Yamamoto, Kazunobu Sato, Shigeaki Nakazawa, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Konstantin Ivanov, Takeji Takui

2.発表標題

Electron Spin Manipulation Utilizing a Chirp Pulse for Molecular Spin Quantum Computing

3.学会等名

The III International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (SPCT-2018)(国際学会)

4.発表年 2018年

1.発表者名

Hiroki Matsui, Hideto Matsuoka, Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Nobuaki Tanaka, Shuichi Suzuki, Keiji Okada, Takeji Takui

2.発表標題

ESR and quantum chemical investigations of electronic structures of organic triplet states affected by pi-conjugation connectivity

3 . 学会等名

XII Russian-Japanese workshop "OPEN SHELL COMPOUNDS AND MOLECULAR SPIN DEVICES"(国際学会)

4.発表年

2018年

1.発表者名

Kenji Sugisaki, Satoru Yamamoto, Shigeaki Nakazawa, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui

2.発表標題

Quantum Chemical Calculations of Open Shell Molecules on Quantum Com-puters: Efficient Construction Methods of the Open Shell Wave Functions

3 . 学会等名

The Third Joint Conference of the Asia-Pacific EPR/ESR Society and The International EPR (ESR) Society (IES) Symposium (国際 学会) 4.発表年

2018年

1.発表者名

塩見大輔、佐藤和信、工位武治

2.発表標題

SQUID磁束計を用いた磁化検出による円偏波ESRの観測

3 . 学会等名

第57回電子スピンサイエンス学会年会

4 . 発表年 2018年 〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6	研究組織		
	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7.科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8.本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関				
ロシア連邦	Novosibirsk State University	Novosibirsk Institute Organic Chemistry			
ロシア連邦	Novosibirsk State University	International Tomography Center SB RAS			
ドイツ	Technische Universitaet Darmstadt	Universitaet Kassel			