

令和 4 年 7 月 5 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K05401

研究課題名(和文) 開殻電子状態を有する金属錯体を用いた1分子トランジスタの理論設計

研究課題名(英文) Theoretical design of single molecule transistor using metal complexes with open-shell electronic states

研究代表者

北河 康隆 (Kitagawa, Yasutaka)

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号：60362612

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、開殻電子状態を有する金属錯体を用いた1分子トランジスタの理論設計を目的とした。そのために、分子構造・スピン状態(電子状態)と電気伝導性の関係性を分子軌道レベルで解明することにより、1分子トランジスタとして機能する錯体の設計指針を構築することを目指した。研究期間で、1次元ニッケル(II)5核錯体において2つの異なるスピン状態で電気伝導度が異なることを示し、外場による電気伝導性の制御の可能性を示唆することができた。加えて、2核錯体において、磁気的相互作用を設計する指針も得た。さらに、磁性とスピンの非局在性との関係や、化学刺激による機能制御の可能性を見出すことに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究分野は、現在欧米を中心に急速に進みつつあり、日本においてもその遂行が急務の課題となっている。本研究では研究期間を通じ、(i)理論的視点から種々の実在化合物の機能発現メカニズムを解明した、(ii)得られた知見から具体的な分子設計指針や機能制御方法を提案した、(iii)実験研究者との共同研究を通じ、得られた結果を実際の合成へとフィードバックすることにより、機能性分子の実現へと貢献した、という3点において学術的な意義があったと考える。また分子デバイス分野への新たな提案を通じ波及効果を与えたいという点で、社会的意義があったと考えられる。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this study is a theoretical design of single-molecule transistors using a metal complex having the open-shell electronic state. For the purpose, we aimed to construct a design guideline for the single-molecule transistor with metal complexes by clarifying a relationship among the molecular structure, spin (electronic) state and electrical conductivity from the viewpoint of the molecular orbitals. During three years, we showed that the one-dimensional pentanuclear nickel (II) complex changes its electrical conductivity by the spin states, suggesting a possibility of control the electrical conductivity by the external magnetic field. In addition, we have also obtained guidelines for designing magnetic interactions in dinuclear metal complexes. Furthermore, we succeeded in discovering the relationship between magnetism and spin delocalization as well as a possibility of the control by chemical stimulation.

研究分野：量子化学・理論化学・錯体化学

キーワード：1分子トランジスタ 理論設計 量子化学 分子エレクトロニクス 単分子電気伝導 分子回路

1. 研究開始当初の背景

コンピュータの進展にみられるように、ナノリソグラフィーの発達は非常にミクロな集積回路の作成に多大な貢献を行った。例えば、最近の CPU では1つのトランジスタに相当するサイズが数～数十 nm 程度のサイズとなっている。これはインフルエンザウイルス（直径約 100nm 程度）よりもはるかに小さく、DNA の1ピッチ（約 3.4nm）に近いことから、まさに分子サイズのデバイスの時代が到来したといえる。集積回路の微細化は高速化や省電力化に貢献してきた一方で、現在ではフォトリソグラフィーによる微細加工技術の限界にほぼ達しており、リーク電流によるエネルギー損失も無視できない。そのような背景から、1分子を1素子として使用する、分子エレクトロニクスが世界的に注目されている。1分子を1つのトランジスタ（電流の on/off の切り替えや増幅）として利用することができれば、集積回路のさらなる微細化に加え、省エネルギー化やデバイスのユビキタス化に繋がることが期待される。加えて、これらの分子素子では、『分子軌道』を用いるため、その量子性から量子メモリ（on/off の保持）など量子デバイスへの応用も視野に入る。したがって、このような“分子”を用いた電流の“スイッチ”を作成することは、次世代のデバイスにおいて大変重要となる。1分子トランジスタを実現するには、電流のスイッチ機能、つまり、『電子の伝達』と『on/off の切り替え』の2つの性質を併せ持ち、『繰り返し使用』できることが条件となる。しかしその実現のための具体的な分子設計指針や制御法は未だ明らかになっておらず、喫緊の課題であった。また、これらは量子現象であるため量子化学理論に立脚したアプローチが必須であった。

他方、電気伝導性を有する分子、すなわち『分子ワイヤー』は、カーボンナノチューブや拡張金属原子鎖（EMACs）などいくつか提案されてきた。もし外場でこれらの分子に on/off のスイッチ機能を付加できるならば、1分子トランジスタの実現の可能性がある。これまでにジアリルエテンの光照射に伴う結合解離を利用した分子スイッチが理論的に予言されていた。しかし結合解離によるスイッチは、繰返し耐久性という点で問題が予想された。そこで本研究では金属錯体に着目した。金属錯体のなかでも特に、多核金属錯体では、強い電子相関からフロンティア軌道が擬縮退し、金属イオン上に局在スピンの現れる場合がある。これを『開殻電子状態』というが、このような系において、スピン多重度などの変化により単分子電気伝導性が制御できれば、耐久性を損ねず、かつ外場（磁場など）で電流の on/off を可能とする1分子トランジスタを設計できる可能性があった。

2. 研究の目的

上記の背景から、本研究では『開殻電子状態を有する金属錯体を用いた1分子トランジスタの理論設計』を目的とした。その達成のために、(1) 実在する1次元錯体や単分子磁石錯体（対象系は後述）において、スピン多重度など電子状態を変えた時の伝導性の変化を、量子化学計算により明らかにし、(2) 『分子構造・スピン状態（電子状態）と電気伝導性』の関係性を分子軌道レベルで解明することにより、1分子トランジスタとして機能する錯体の設計指針を構築する。そして(3) 実際に具体的な錯体を提案し、予想される物性値を示す、という三点を遂行することを研究の具体的な目標とした。

3. 研究の方法

上の目的で述べた(1)～(3)の課題に対し、(a) 量子化学計算により、対象化合物の分子構造、電子状態を詳細に調べ、さらに電気伝導度を異なるスピン状態での算出し、その違いを明らかにする。(b) 得られた結果から分子構造、電子（スピン）状態・伝導性の相関を分子軌道レベルで明らかにする。(c) そして『外場（磁場など）で、on/off 状態のスイッチを行う』ための設計指針の構築を行う、というアプローチにて研究を遂行した。

4. 研究成果

初年度である2019年度は、拡張金属原子鎖（EMACs）のスピン状態による電気伝導性の違いを明らかにすることを実行した。実在する1次元ニッケル(II)5核錯体に注目し、スピン多重度による電気伝導性の違いを、密度汎関数法と弾性散乱グリーン関数法を用い調べた。その結果、2つの異なるスピン状態（1重項と5重項）で電気伝導度が異なり、励起状態である5重項では基底状態である1重項の約1.6倍の伝導度を示すことが明らかとなった（図1）。

この結果より、外場（磁場など）による電気伝導性の制御の可能性を示唆することができた。この結果から、低スピン状態（分子内反強磁性的相互作用状態）は電子相関が強く、伝導性に寄与する軌道が局在するため伝導性が減少する傾向がある一方、高スピン状態では、それがなく比較的高い電導性を得やすいという結論が得られた。しかし、それではどのように欲しいスピン状態あるいはスピン状態間の相対安定性を設計するかという点については、問題が残されていた。言い換えるならば、高い伝導性を与える高スピン状態が、低スピン状態に対して非常に不安定で

あれば、磁場で伝導性を制御することができない。そこで、スピン状態間のエネルギーギャップ制御の可能性として、2核錯体において、強磁性相互作用状態を発現させる設計指針に関しても得ることができた。上記の結果に関しては2報の論文として、英文論文誌上梓した (*Molecules* **2019**, *24*, 1956, *Magnetochemistry* **2020**, *6*, 10 (Cover Figure Article))。また、他にも実験研究者との共同研究として、分子の磁性と電子状態の関係について論文を執筆した。

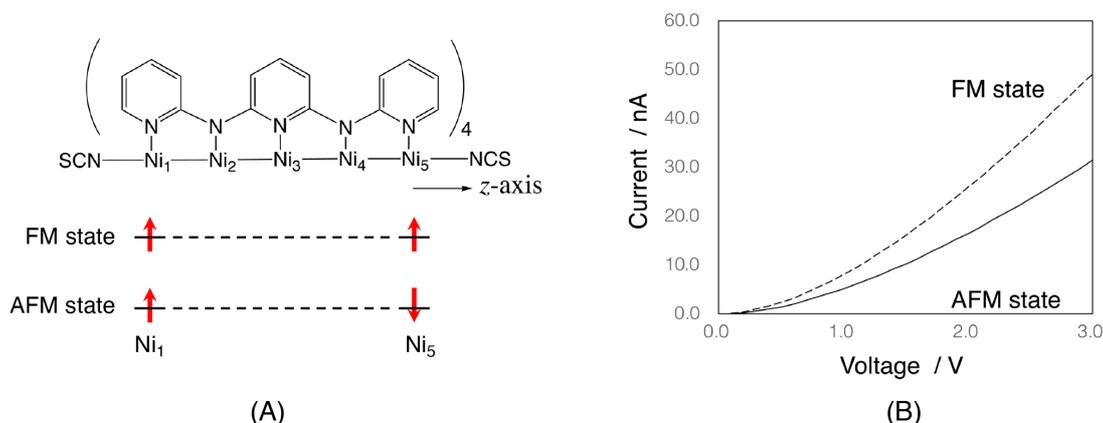


図1 (A) Ni 5核錯体の模式図と、5重項(強磁性結合状態: FM state)ならびに1重項(強反磁性結合状態: AFM state)のスピンの配列の模式図。(B) 計算された5重項ならびに1重項の電流-電圧曲線。

二年目である2020年度は、さらに研究を進め具体的な化合物を提案し、国際会議での口頭発表(2件)において発表した。また、その他の分子素子の可能性を探るという視点から、東北大学・山下グループとの共同を行い、単分子磁石の磁性とスピンの非局在性(伝導性に関係)との関係を示すことに成功した。特に、ダブルデッカー型フタロシアニン-テレルビウム錯体においてスピン源となるTb(III)イオンのf軌道が、配位子の π 軌道と相互作用し、物性に影響を与えている可能性を示すことに成功した。これはつまり、このような π 軌道を有する単分子磁石を集積させた場合、 π 軌道で伝導性を保持しつつ、f軌道のスピンの何らかの制御を可能とすることを示唆している。この成果も論文(*Chem. Euro. J.* **2020**, *26*, 8621)にまとめた。加えて、外場として磁場だけでなく他の刺激による電子状態制御の可能性を探るという観点から、東北大学・宮坂グループとの共同研究を行い、Ru2核錯体とTCNQ誘導体とを組み合わせ配位高分子が、吸蔵二酸化炭素により電子状態の変化が起こることをより見出した(図2)。吸蔵された二酸化炭素が、骨格のRu2と分子軌道的な相互作用をもち、その結果、配位高分子の電子/スピン状態が変化するという結果は、磁場などの外場のみならず、吸蔵分子という科学的刺激によっても伝導性を制御できるということを示している。この成果は論文(*Nature Chemistry* **2021**, *13*, 191)にまとめた。

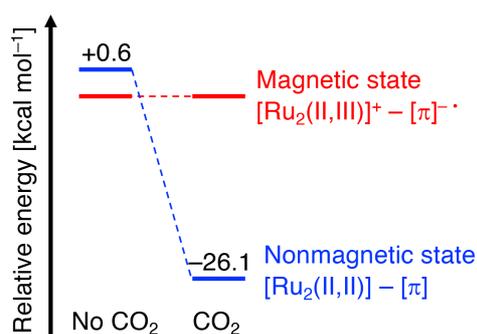


図2 CO₂の吸着による電子状態変化の模式図

最終年度である2021年度では、実在系での外部刺激によるスピン状態や電子状態の制御という視点で研究を進めた。現状では単分子での測定は難しい部分もあることから、現実的な系として複数の分子が組み合わさった系や生体分子の制御機構などにも着目した。一例として、生体内で電子輸送を担う電子伝達タンパク質は、自在に電子状態を制御することが知られているが、その原因として、水素結合が大きく寄与していることも明らかにした。このような電子状態変化により伝導性も変化することが容易に予想され、磁場などの外場刺激だけではなく、局所的な水素結合の組み替えという刺激においても電子状態と物性を変化させられる可能性が示された。つまり、水素結合の化学刺激により単分子トランジスタを動作させる、分子センサーの可能性を意味している。上記の結果に関しては、英文論文誌に上梓した (*Molecules* **2021**, *26*, 6129)。

また、この3年間で数多くの実験研究者との共同研究を行い、非常に多くの論文発表・学会発表を行った。それらの成果のほとんどが機能性分子の研究であり、実験にフィードバックすることにより、将来の分子素子に向けた研究へと寄与することができた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Nakaya Masato, Kitagawa Yasutaka, Watanabe Shinta, Teramoto Rena, Era Iori, Nakano Masayoshi, Onoe Jun	4. 巻 5
2. 論文標題 Immobilization of CO ₂ at Room Temperature Using the Specific Sub nm Space of 1D Uneven Structured C60 Polymer Film	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advanced Sustainable Systems	6. 最初と最後の頁 2000156(1~5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adsu.202000156	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 Horii Yoji, Damjanovic Marko, Ajayakumar M. R., Katoh Keiichi, Kitagawa Yasutaka, Chibotaru Liviu, Ungur Liviu, Mas Torrent Marta, Wernsdorfer Wolfgang, Breedlove Brian K., Enders Markus, Veciana Jaume, Yamashita Masahiro	4. 巻 26
2. 論文標題 Highly Oxidized States of Phthalocyaninato Terbium(III) Multiple Decker Complexes Showing Structural Deformations, Biradical Properties and Decreases in Magnetic Anisotropy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 8621 ~ 8630
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202001365	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 Zhang Jun, Kosaka Wataru, Kitagawa Yasutaka, Miyasaka Hitoshi	4. 巻 13
2. 論文標題 A metal-organic framework that exhibits CO ₂ -induced transitions between paramagnetism and ferrimagnetism	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Chemistry	6. 最初と最後の頁 191 ~ 199
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41557-020-00577-y	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 北河康隆	4. 巻 2
2. 論文標題 多核遷移金属錯体へのスピン非制限計算法の適用	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 理論化学会誌「フロンティア」	6. 最初と最後の頁 66-71
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 Fujii Takuya, Kitagawa Yasutaka, Ikenaga Kazuki, Tada Hayato, Era Iori, Nakano Masayoshi	4. 巻 6
2. 論文標題 Theoretical Study on Magnetic Interaction in Pyrazole-Bridged Dinuclear Metal Complex: Possibility of Intramolecular Ferromagnetic Interaction by Orbital Counter-Complementarity	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Magnetochemistry	6. 最初と最後の頁 10 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/magnetochemistry6010010	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kitagawa Yasutaka, Tada Hayato, Era Iori, Fujii Takuya, Ikenaga Kazuki, Nakano Masayoshi	4. 巻 24
2. 論文標題 Theoretical Study on the Difference in Electron Conductivity of a One-Dimensional Penta-Nickel(II) Complex between Anti-Ferromagnetic and Ferromagnetic States? Possibility of Molecular Switch with Open-Shell Molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 1956 ~ 1956
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules24101956	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 ERA Iori, KITAGAWA Yasutaka, TADA Hayato, FUJII Takuya, IKENAGA Kazuki, NAKANO Masayoshi	4. 巻 18
2. 論文標題 Theoretical Study on the Effects of Environment around the Active Site on Ionization Potential in [2Fe-2S] Ferredoxin	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 239 ~ 240
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2019-0044	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Kaede, Harada Yukina, Ikenaga Kazuki, Kitagawa Yasutaka, Nakano Masayoshi, Kajiwara Takashi	4. 巻 5
2. 論文標題 Correlation between Slow Magnetic Relaxations and Molecular Structures of Dy(III) Complexes with N5O4 Nona-Coordination	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Magnetochemistry	6. 最初と最後の頁 27 ~ 27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/magnetochemistry5020027	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zhang Jun, Kosaka Wataru, Kitagawa Yasutaka, Miyasaka Hitoshi	4. 巻 58
2. 論文標題 Host-Guest Hydrogen Bonding Varies the Charge State Behavior of Magnetic Sponges	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 7351 ~ 7356
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201902301	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 Shiraishi Yasuhiro, Takii Takahiro, Hagi Takumi, Mori Shinnosuke, Kofuji Yusuke, Kitagawa Yasutaka, Tanaka Shunsuke, Ichikawa Satoshi, Hirai Takayuki	4. 巻 18
2. 論文標題 Resorcinol-formaldehyde resins as metal-free semiconductor photocatalysts for solar-to-hydrogen peroxide energy conversion	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Materials	6. 最初と最後の頁 985 ~ 993
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41563-019-0398-0	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 Nakashima Kensuke, Shimizu Takeshi, Kamakura Yoshinobu, Hinokimoto Akira, Kitagawa Yasutaka, Yoshikawa Hirofumi, Tanaka Daisuke	4. 巻 11
2. 論文標題 A new design strategy for redox-active molecular assemblies with crystalline porous structures for lithium-ion batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 37 ~ 43
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04175c	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 Nakamae Kanako, Nakajima Takayuki, Ura Yasuyuki, Kitagawa Yasutaka, Tanase Tomoaki	4. 巻 59
2. 論文標題 Facially Dispersed Polyhydride Cu ₉ and Cu ₁₆ Clusters Comprising Apex Truncated Supertetrahedral and Square Face Capped Cuboctahedral Copper Frameworks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 2262 ~ 2267
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201913533	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 Tada Kohei, Kawakami Takashi, Kitagawa Yasutaka, Okumura Mitsutaka, Yamaguchi Kizashi, Tanaka Shingo	4. 巻 49
2. 論文標題 Comparison of Effective Exchange Integrals of H-H and H-He-H Chains vs. Single Molecules: A Theoretical Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 137 ~ 140
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.190806	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 -

〔学会発表〕 計31件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 北河康隆
2. 発表標題 鉄硫黄クラスター含有タンパク質の酸化還元電位制御における水素結合の役割 -量子化学計算から明らかになったこと-
3. 学会等名 茨城大学 令和2年度 第2回量子線科学セミナー (オンライン開催) (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤 宏賢, 池永 和輝, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 量子化学計算および多変量解析法を用いたトリス(2,2'-ピリジン)ルテニウム(II)錯体のLUMOのエネルギーと置換基種の相関に関する理論研究
3. 学会等名 錯体化学会第70回討論会 (オンライン開催)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical study on metal-metal and metal-ligand interactions in polynuclear metal complexes
3. 学会等名 錯体化学会第70回討論会 (オンライン開催) Symposium S2 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 池永 和輝, 北河 康隆, 加藤 恵一, 山下 正廣, 中野 雅由
2. 発表標題 ダブルデッカー型ランタノイド(III)-フタロシアニン 錯体における分子間磁氣的相互作用に関する理論研究
3. 学会等名 錯体化学会第70回討論会 (オンライン開催)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 甘水君佳, 池永和輝, 佐藤宏賢, 北河康隆, 中野雅由
2. 発表標題 分子回路設計に向けたアヌレンの単分子伝導に関する理論研究
3. 学会等名 分子科学オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 甘水 君佳、佐藤 宏賢、池永 和輝、北河 康隆、中野 雅由
2. 発表標題 アヌレンの単分子電気伝導特性に関する理論研究
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤 宏賢、甘水 君佳、池永 和輝、北河 康隆、中野 雅由
2. 発表標題 多変量解析法を用いたトリス(2,2'-ピピリジン)ルテニウム(II)錯体のLUMO のエネルギーと置換基種との関連性についての理論研究
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 北河 康隆、Jun Zhang、高坂 亘、宮坂 等、中野 雅由
2. 発表標題 ドナーおよびアクセプター分子からなる金属有機構造体 (MOF) の吸蔵分子による磁性変化に関する理論研究
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 長 奎吾、池永 和輝、北河 康隆、中野 雅由
2. 発表標題 3つのアセチルアセトナト配位子を持つジスプロシウム(III)錯体の磁気異方性に関する理論研究
3. 学会等名 京都大学福井謙一記念研究センターオンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 池永 和輝、北河 康隆、加藤 恵一、山下 正廣、中野 雅由
2. 発表標題 ダブルデッカー型テルビウム(III) フタロシアニン錯体におけるf-f 相互作用と磁気異方性に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第101回春季年会(2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 甘水 君佳、佐藤 宏賢、池永 和輝、北河 康隆、中野 雅由
2. 発表標題 分子回路設計を目指した環状 共役系化合物の単分子電気伝導に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第101回春季年会(2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤 宏賢、甘水 君佳、池永 和輝、北河 康隆、中野 雅由
2. 発表標題 多変量解析による[Ru(bpy) ₃] ²⁺ のLUMOのエネルギーと配位子に導入された置換基の関係に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第101回春季年会(2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 長 奎吾、池永 和輝、北河 康隆、中野 雅由
2. 発表標題 3つのアセチルアセトナト配位子を有するジスプロシウム(III)錯体の電子状態と磁気異方性に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第101回春季年会(2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Kitagawa, T. Fujii, H. Tada, I. Era, K. Ikenaga, M. Nakano
2. 発表標題 DFT study of ferromagnetic interaction in homonuclear bi-metallic complex: Orbital complementarity revisited
3. 学会等名 The 1st Asian Conference on Molecular Magnetism (ACMM) (online) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Designing Magnetism of Metal Complex: A Quantum Chemical Approach
3. 学会等名 2021 ASEAN Joint Workshop (online) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yasutaka Kitagawa, Hayato Tada, Naoka Amamizu, Kazuki Ikenaga, Hiromasa Sato, Iori Era, Takuya Fujii and Masayoshi Nakano
2. 発表標題 Difference in electron conductivity of one-dimensional metal cluster by electronic and spin states -Theoretical study on possibility of single molecule transistor-
3. 学会等名 12th Japan-China Joint Symposium on Metal Cluster Compounds (12th JCSMCC) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasutaka Kitagawa, Hitoshi Miyasaka, Masayoshi Nakano
2. 発表標題 Theoretical study of intra-molecular ferromagnetic interaction in Mn(III)-saltmen dimer complex
3. 学会等名 The 13th Japanese-Russian Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasutaka Kitagawa, Hayato Tada, Naoka Amamizu, Kazuki Ikenaga, Hiromasa Sato, Iori Era, Takuya Fujii and Masayoshi Nakano
2. 発表標題 Theoretical study on single molecule conductivity of extended metal atom chains (EMACs) -Toward realization of single-molecule transistor-
3. 学会等名 International Symposium for Nano Science (ISNS2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasutaka Kitagawa, Hayato Tada, Naoka Amamizu, Kazuki Ikenaga, Hiromasa Sato, Iori Era, Takuya Fujii, Masayoshi Nakano
2. 発表標題 Theoretical study on electron conductivity of extended metal atom chains (EMACs) complexes
3. 学会等名 18th Asian Chemical Congress (18th ACC) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 北河康隆・池永和輝・多田隼人・藤井琢也・江良伊織・加藤恵一・山下正廣・中野雅由
2. 発表標題 TbPc2錯体内のf-pi磁氣的相互作用における置換基効果に関する理論研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasutaka KITAGAWA, Kazuki IKENAGA, Hayato TADA, Iori ERA, Takuya FUJII, Keiichi KATOH, Masahiro YAMASHITA, Masayoshi NAKANO
2. 発表標題 Theoretical study of substitution effect on f- pi magnetic interaction in TbPc2 complex
3. 学会等名 錯体化学会第69回討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuki Ikenaga, Yasutaka Kitagawa, Keiichi Katoh, Masahiro Yamashita, Masayoshi Nakano
2. 発表標題 Theoretical Study on Intermolecular Magnetic Interaction of Double-Decker Phthalocyaninato Terbium(III) Complex
3. 学会等名 18th Asian Chemical Congress (18th ACC) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 北河康隆、多田隼人、江良伊織、藤井琢也、池永和輝、中野雅由
2. 発表標題 多核金属錯体の電子状態・スピン状態と電気伝導性の関係
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 多田隼人、江良伊織、藤井琢也、池永和輝、北河康隆、中野雅由
2. 発表標題 パドルホイル型二核金属錯体の配位子種が単分子電気伝導性に与える影響に関する理論研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤井 琢也、江良 伊織、多田 隼人、池永 和輝、北河 康隆、中野 雅由
2. 発表標題 ピラゾール架橋二核錯体における金属イオン間の分子内磁氣的相互作用の理論研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 池永和輝・北河康隆・加藤恵一・山下正廣・中野雅由
2. 発表標題 二層積層型イットリウム(III) - フタロシアニン錯体の磁氣的な分子間相互作用に関する理論研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤井琢也・江良伊織・多田隼人・池永和輝・北河康隆・中野雅由
2. 発表標題 ピラゾール架橋二核金属錯体における分子内磁氣的相互作用の理論研究
3. 学会等名 錯体化学会第69回討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 池永和輝・北河康隆・加藤恵一・山下正廣・中野雅由
2. 発表標題 二層積層型イットリウム(III) フタロシアニン錯体における分子間磁氣的相互作用の理論研究
3. 学会等名 錯体化学会第69回討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 多田隼人・江良伊織・藤井琢也・池永和輝・北河康隆・中野雅由
2. 発表標題 パドルホイール型二核金属錯体における単分子電気伝導性の配位子種依存性に関する理論研究
3. 学会等名 錯体化学会第69回討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 多田隼人、江良伊織、藤井琢也、池永和輝、北河康隆、中野雅由
2. 発表標題 パドルホイール型二核金属錯体の架橋配位子種が単分子電気伝導性に及ぼす影響に関する理論研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会 2019秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤井 琢也、江良 伊織、多田 隼人、池永 和輝、北河 康隆、中野 雅由
2. 発表標題 ピラゾール架橋二核金属錯体の分子内磁氣的相互作用における架橋配位子効果の理論研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会 2019秋季年会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

二酸化炭素の吸脱着による磁石のON-OFF制御に成功
https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2020/20201201_1
フラーレンポリマー薄膜内の特異なナノ空間反応場を使って二酸化炭素と水が室温で反応することを発見
https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2020/20201027_1

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			
ドイツ	Heidelberg University	Karlsruhe Institute of Technology(KIT)		
その他の国・地域	National Taipei University of Technology			