

令和 6 年 6 月 13 日現在

機関番号：15401

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01921

研究課題名（和文）可視光応答性 単結合(C-C)化合物の長寿命化に基づく新しい分子素材の開発

研究課題名（英文）Development of New Molecular Materials Based on Visible Light Responsive p-Single Bonded species

研究代表者

安倍 学 (Abe, Manabu)

広島大学・先進理工系科学研究科（理）・教授

研究者番号：30273577

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,500,000円

研究成果の概要（和文）：分子・物質の機能は、その電子構造と3次元的な形に由来する。本研究では、独自に見出してきた 単結合化合物を、置換基、分子骨格、並びに媒質効果によって長寿命化/単離し、光物性測定、光電子分光、核磁気共鳴測定、さらには、X線構造解析を行い、その電子構造と分子構造の全貌を明らかにし、太陽電池、発光材料、非線形光学材料などの光に応答する分子素材の開発研究へと展開した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

分子・物質の機能は、その電子構造と3次元的な形に由来する。本研究では、平面4配位炭素をもつ 単結合(C-C)の創製と、その新奇な 結合様式 が小さな 電子系にも関わらず、可視-近赤外領域に強い光吸収機能を示すことを明らかにした。本研究では、独自に見出してきた 単結合化合物を、置換基、分子骨格、並びに媒質効果によって長寿命化/単離し、光物性測定、光電子分光、核磁気共鳴測定、さらには、X線構造解析を行い、その電子構造と分子構造の全貌を明らかにすることができた。

研究成果の概要（英文）：The functionality of molecules and materials arises from their electronic structure and three-dimensional shape. In this study, we have investigated  $\pi$ -conjugated compounds that we independently discovered. By substituting functional groups, modifying molecular skeletons, and considering solvent effects, we extended their lifetimes and isolated them. We conducted optical property measurements, photoelectron spectroscopy, nuclear magnetic resonance measurements, and even X-ray crystallography to reveal the complete picture of their electronic and molecular structures. These efforts have led to the development of molecular materials that respond to light, such as solar cells, luminescent materials, and nonlinear optical materials.

研究分野：物理有機化学

キーワード： 単結合 可視吸収 酸化還元活性

## 様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

化学反応性、光応答性、酸化還元活性などの分子の機能を支配する電子構造と分子構造は、構成原子の空間配置を決める化学結合により制御される。例えば、エタン類( $\text{CR}_3-\text{CR}_3$ )は、強い結合のみで構成されており化学的反応性に乏しい。一方、エチレン類( $\text{CR}_2=\text{CR}_2$ )は平面構造の上下に機能発現の源である。電子雲が広がり、機能の宝庫とされる。その HOMO-LUMO ギャップが酸化還元活性と光応答性を制御する。このように、原子間の結合様式の相違がもたらす電子構造と分子構造の変化は、分子・物質が本来有する機能に大きく影響を与える。未開拓な結合様式を創製することができれば、新たな物質群を研究現場に提供でき、持続可能な社会の発展につながる新しい物質科学を切り拓くことができる。

報告者は、これまでに実施した基盤研究 B や新学術領域研究において、未開拓な結合様式「結合のみによる原子と原子の結びつき：単結合 ( $\text{C}-\text{C}$ )」を考案した(*Chem. Lett.*, 2017, 1586 (highlight review))。2つの炭素ラジカル  $\text{R}_3\text{C}\cdot$  の p 軌道が平行に配向した新奇な結合様式は、平面 4 配位炭素原子を有し新しい分子構造を創出することができる。また、単結合の  $\sigma$  軌道の HOMO-LUMO エネルギー差( $\Delta E$ )はエチレン類のエネルギー差( $\Delta E$ )と比べて小さく、単結合化合物は可視光吸収や酸化還元反応などの外部刺激に感度よく応答する分子群であり、次世代の可視光応答性材料として期待される。単結合を構築するためには、ラジカル対が一重項である必要があり、また、そのラジカル対が  $\sigma$  結合を形成し難い分子設計が必須である。そこで、結合生成物が高い歪みエネルギーを有する環状骨格内に2つのラジカルを有する化合物に着目し、その(1)スピン多重度制御と(2)単結合性化合物の実験的発生に挑戦してきた。その結果、(1)置換基が電子求引性の場合に一重項が基底状態になることを見出し、また、(2)アゾ前駆体の光脱窒素反応において、スチルベン( $\text{PhHC}=\text{CHPh}$ ,  $\lambda_{\text{max}} = \sim 340 \text{ nm}$ )と同じ電子数にもかかわらず、可視光領域の 580 nm 付近に吸収極大をもつ単結合化学種の創製に成功した。このように、報告者らは世界に先駆け、新たな結合様式・単結合( $\text{C}-\text{C}$ )を提唱しその構築に成功してきた。この研究成果を踏まえ、本研究では、以下の研究課題の核心をなす学術的な問いに答える基盤研究を実施した。

本研究課題の核心をなす学術的な問い

一重項ラジカル性を持つ新奇な単結合( $\text{R}_3\text{C}-\text{CR}_3$ )化合物の置換基、分子骨格・媒質効果による長寿命化/単離は可能か。

単結合化合物と従来型分子の電子構造と分子構造の違いと特徴は何か。

単結合性化合物の光応答性、酸化還元活性、多光子吸収活性は次世代機能性光応答性分子素材開発に資するか。

### 2. 研究の目的

環境・エネルギー問題を緩和する機能性材料の開発研究は欠かせない。これまでに数多くの共役電子系化合物が設計、合成され、色素系太陽電池、有機 EL などの材料として使用されている。可視領域に光応答性をもたせるため、分子量が大きな共役系が必要である。より小さな HOMO-LUMO ギャップをもつ新しい電子系化合物群を創製できれば、アトムエコノミーの観点からもより優れた材料開発につながる。報告者は、世界に先駆け、HOMO-LUMO ギャップが小さな結合のみで繋がった単結合を考案し、実験的に単結合化学種の発生に成功してきた。本基盤研究 B では、これまでの研究で見出した研究成果を飛躍的に発展させるべく、新奇な単結合化学種の化学を明らかにすることを目的とし、持続的な社会の発展に寄与する機能開拓研究を実施した。

### 3. 研究の方法

本研究の目的を達成するため、以下の研究の方法を実施した。

室温での単結合化合物の長寿命化：我々は、77-120 K の低温での単結合種の単離に成功している。室温付近で単結合種が単離可能になればより詳細に単結合の化学を明らかにすることができる。そこで、高い置換基とマクロ環による単結合化学種の長寿命化を実施する。

・高い置換基効果の検討：単結合性一重項ラジカル寿命は結合化合物への環化反応速度で決まる。その際、平面構造のアリール基が近づき結合になる。この過程を速度論的に遅くする事が出来れば、単結合種の長寿命化が実現できる。そこで、適度な空間を持つ高い置換基として *m*-terphenyl 基を用い、単結合化合物の速度論的安定化を諮る。

・分子歪みに基づくストレッチ効果の検討：分子歪み効果を利用した単結合化合物の長寿命化を実施する。具体的には、単結合を中員環の骨格内に導入し、単結合の2つの炭素が分子歪みによるストレッチ効果によって近づけない設計を施した分子を合成する。つまり、2,7-ナフタ

レンや 3,6-フェナントレン等の 平面ユニットをマクロ環内に導入し、結合化合物で生じる平面ユニットの歪に基づく 単結合の速度論的安定化を試みる。  
 ・粘度効果による 単結合化学種の長寿命化: 上記したように、単結合は 結合へと化学変化する。この過程は、置換基の大きな動きを伴う。そこで、単結合性化合物の寿命に及ぼす置換基と溶媒の粘度効果との相関関係を精査し、単結合化学種の長寿命化を実現する。粘度効果を精査する上で、反応ダイナミクスに及ぼす溶媒効果の専門家である大賀恭博士と重光保博博士を協同研究者として加え、動的分子運動に及ぼす粘度効果の詳細を明らかにする。具体的には、ほぼ同じ極性を有するが粘度が大きく異なるシクロヘキサンとジシクロヘキシルメチルペンタン中での 単結合化合物と嵩高い置換基を持つ場合の寿命に及ぼす粘度効果を精査する。

#### 4. 研究成果

2021 年度は、ジラジカルユニットを湾曲したパラフェニレン骨格で結合させたマルチラジカル種に着目した。湾曲したパラフェニレン骨格に繋がれたジラジカルは、環形成に伴う湾曲効果によって誘起されたラジカル間の結合性相互作用によって、共役系の伸びたキノイド構造の形成や平面芳香族性の発現などの直鎖状とは異なる性質を有することが予想される。湾曲したパラフェニレンで繋がれた環状ジラジカル前駆体となるアゾ分子を設計し、量子化学計算によって、そのスピン多重度と構造に対する 電子系の湾曲効果を調査した。また、 $\beta$ CPP ユニットを持つ前駆体の合成に成功し、それらの光学特性・光反応性を調査した。その結果、マクロ環骨格内でのマルチラジカル種は非環状のものよりも反応性に富む新たな知見を見出し、加えて、湾曲効果により最安定スピン多重度が変化することを理論・実験的に明らかにした(図1)。

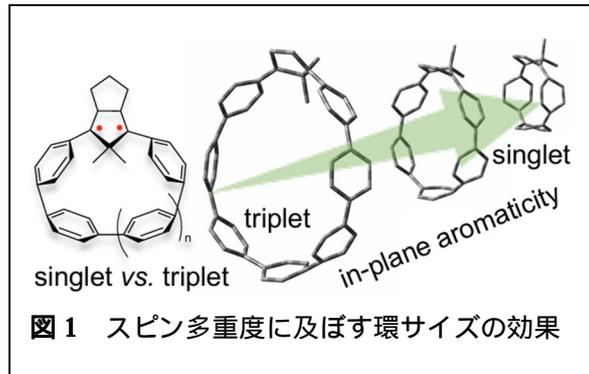


図1 スピン多重度に及ぼす環サイズの効果

2022 年度は、対象分子として、2つのアゾユニットを 4 枚ずつのベンゼン環で架橋した環状アゾ分子及び 3つのアゾユニットを 2枚及び 3 枚のベンゼン環で架橋した環状アゾ分子を設計・合成した。それらの光脱窒素反応によって発生したマルチラジカルのスピン状態やキノイド特性を紫外可視吸収スペクトル測定や電子スピン共鳴測、量子化学計算を用いて精査した。2つのアゾユニットから発生させたテトララジカルの電子スピン共鳴測定では、発生したテトララジカルは五重項種ではなく、熱励起で存在する三重項種として観測されることが示唆された。量子化学計算から、湾曲構造によって誘起されるベンゼン環 4 枚を介した弱いスピン相互作用によって、基底一重項になることを明らかにした(図2)。直鎖分子では、基底三重項であるため、環状骨格にすることによって基底スピン状態が変化していることを明らかにした。

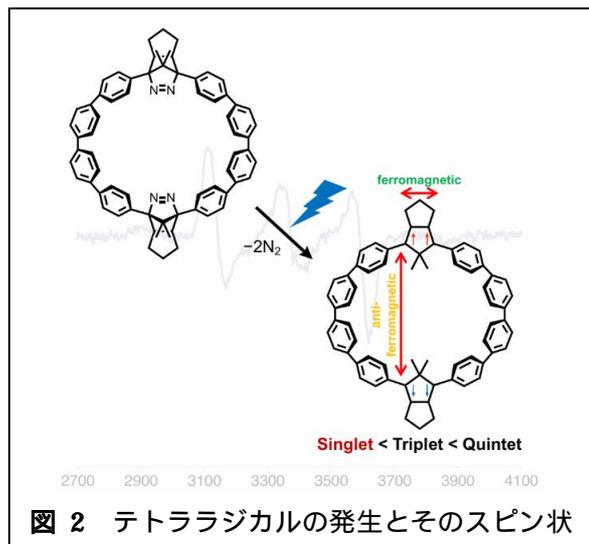


図2 テトララジカルの発生とそのスピン状態

2023 年度は、平面アゾ化合物 AZ1 の合成に成功した(図3)。355 nm のレーザー照射による過渡吸収スペクトルを測定すると、室温で 260 ミリ秒程度の寿命をもった 単結合化合物 1 を観測した。最終生成物は環化体 -1 ではなく、メトキシ基が転位した生成物 MG1 であった。奇妙なことにその過渡種の寿命は温度に影響がなかった。寿命の再測定をしている間に、寿命に再現性がとれないことがわかった。その原因を究明するために、まず、過渡吸収分光装置のモニター光の強度依存性を調べた(図4)。その結果、モニター強度を変化させると 単結合化合物の寿命が変化することを見いだした。モニター光を弱くすると、20 で、約 4 秒以上の寿命を有していることが判明した。つまり、単結合化学種は光反応性に富んでおり、容易に結合開裂し

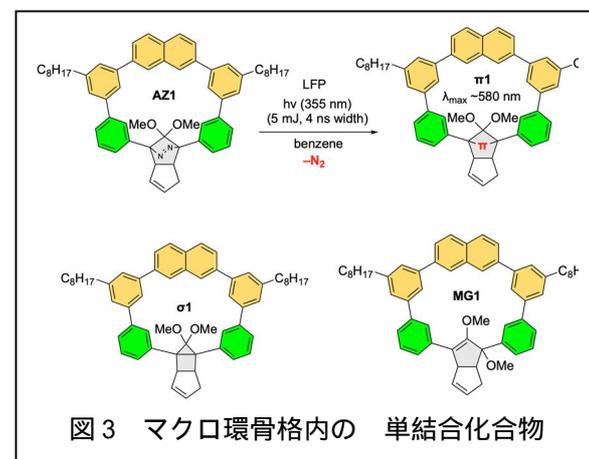


図3 マクロ環骨格内の 単結合化合物

て MG1 を与えていた .また , 単結合化合物の方が 結合生成物よりもエネルギー的に安定であることは , 580 nm のシグナルに立ち上がりが観測されたことで証明できた ( 図 4 ) .

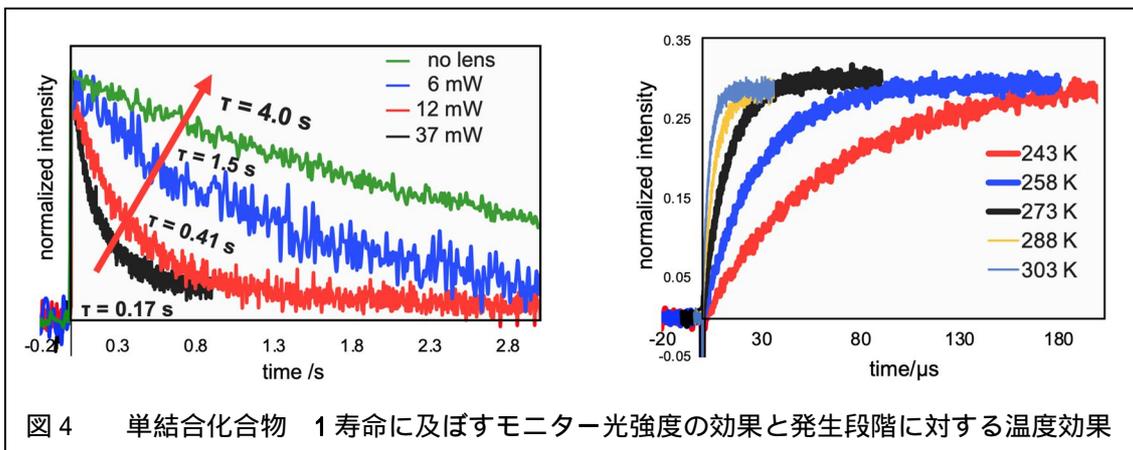


図 4 単結合化合物 1 寿命に及ぼすモニター光強度の効果と発生段階に対する温度効果

単結合化学種の結合度を定量的にどのように表現するか . ジラジカル性という指標は存在するが , もう少し結合性と関連づけたかった . そこで , CASSCF 計算を行い , いわゆる結合次数 (  $BO = (\text{結合性軌道の電子数} - \text{反結合性軌道の電子数}) \div 2$  ) を用いることにした . つまり , 結合の結合度は , 結合の開殻性を正確に知ることができる CAS 計算で表せる . 室温で 4 秒以上の寿命を有するマクロ環をする 単結合について計算を行ってみると , 結合性軌道 ( ) に 1.46 , 反結合性軌道 ( \* ) に 0.54 存在している

ことが判明した ( 図 5 ) . このことから , 結合次数は 0.46 と求めることが出来 , 同じ 電子数で構成される スチルベンの 結合 (  $BO = 1$  ) と比較して , 弱い結合を有している . フロンティア軌道の図からも判断できるように , 電子系のマクロ環を使用しているが , メタ位で繋げているので , ほぼ , 1,3-ジフェニルユニットの部位に電子は局在化しており , 今回デザインしたマクロ環は優れたストレッチユニットであった . 今後は , 新たな結合様式 : 単結合の物性と機能の開拓と , より長寿命化を目指した脱離性があまりない , 2 位の置換基のデザインを行い , 手に取れる炭素-炭素 結合の新しい化学を確立する .

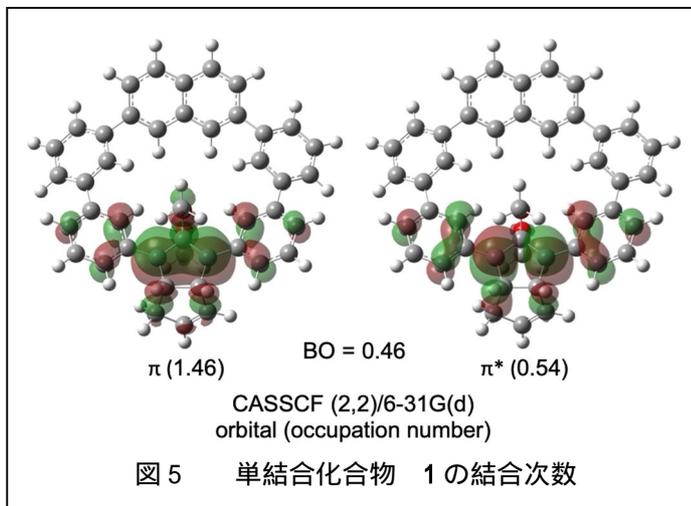


図 5 単結合化合物 1 の結合次数

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計24件（うち査読付論文 24件 / うち国際共著 9件 / うちオープンアクセス 9件）

1. 著者名 Sansalone Lorenzo, Zhao Jun, Nguyen Linh T. B., Gupta Swati, Benson Deanna L., Abe Manabu, Ellis Davies Graham C. R.	4. 巻 63
2. 論文標題 Bidirectional Neuronal Actuation by Uncaging with Violet and Green Light	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202401117
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202315726	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 Ghosh Titli, Kaizawa Hazuki, Funato Shohei, Rahman M. Azadur, Sasaki Norihiko, Nokami Toshiki, Abe Manabu, Nishikata Takashi	4. 巻 11
2. 論文標題 Formation of Sterically Congested C-N Bonds by Electrochemical Reductive Coupling of Amines and Bromocarboxamides	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 ChemElectroChem	6. 最初と最後の頁 e202300636
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/celec.202300636	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 該当する
1. 著者名 Takano Ma aya, Antol Ivana, Abe Manabu	4. 巻 27
2. 論文標題 Substituent Effects on the Electronic Ground State (Singlet versus Triplet) of Indenyl Cations: DFT and CASPT2 Studies	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 European Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e202301226
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejoc.202301226	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 該当する
1. 著者名 Kondoh Masato, Kuboki Shunsuke, Kume Hidetaka, Oda Eriku, Abe Manabu, Ishibashi Taka aki	4. 巻 37
2. 論文標題 Substituted effects on bonding characteristics of cyclopentane 1,3 diyl diradicals monitored by time resolved infrared spectroscopy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physical Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e4575
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/poc.4575	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 Liu Qian, Onishi Keita, Miyazawa Yuki, Wang Zhe, Hatano Sayaka, Abe Manabu	4. 巻 145
2. 論文標題 Energetically More Stable Singlet Cyclopentane-1,3-diyl Diradical with -Single Bonding Character than the Corresponding -Single Bonded Compound	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 27089 ~ 27094
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.3c10971	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 Okumatsu Daichi, Kiyokawa Kensuke, Bao Nguyen Linh Tran, Abe Manabu, Minakata Satoshi	4. 巻 15
2. 論文標題 Photoexcitation of (diarylmethylene)amino benziodoxolones for alkylamination of styrene derivatives with carboxylic acids	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 1068 ~ 1076
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3sc06090j	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 Yonekura Kyohei, Aoki Kohei, Nishida Tomoya, Ikeda Yuko, Oyama Ryoko, Hatano Sayaka, Abe Manabu, Shirakawa Eiji	4. 巻 29
2. 論文標題 Photoinduced Aminoalkylation of Sulfonylarenes with Alkylamines	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry -A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202302658
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202302658	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 Latrache Mohammed, Lefebvre Corentin, Abe Manabu, Hoffmann Norbert	4. 巻 88
2. 論文標題 Photochemically Induced Hydrogen Atom Transfer and Intramolecular Radical Cyclization Reactions with Oxazolones	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 16435 ~ 16455
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.3c01951	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 Nguyen Linh Tran Bao, Abe Manabu	4. 巻 96
2. 論文標題 Development of Photoremovable Protecting Groups Responsive to Near-Infrared Two-Photon Excitation and Their Application to Drug Delivery Research	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 899 ~ 906
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20230140	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 Amado Patricia S. M., Lopes Susy, Brs Elisa M., Paixo JosA., Takano Ma aya, Abe Manabu, Fausto Rui, Cristiano Maria L. S.	4. 巻 29
2. 論文標題 Molecular and Crystal Structure, Spectroscopy, and Photochemistry of a Dispiro Compound Bearing the Tetraoxane Pharmacophore	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202301315
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202301315	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 該当する

1. 著者名 Miyazawa Yuki, Wang Zhe, Hatano Sayaka, Takagi Ryukichi, Matsuoka Hideto, Amamizu Naoka, Kitagawa Yasutaka, Kayahara Eiichi, Yamago Shigeru, Abe Manabu	4. 巻 29
2. 論文標題 Generation and Characterization of a Tetraradical Embedded in a Curved Cyclic Paraphenylene Unit	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202301009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202301009	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 George Sobiya, Govorov Dmitrii, Gatlin DeVonna M., Merugu Rajkumar, Wasson Fiona J., Shields Dylan J., Allen Yasmine, Muthukrishnan Sivaramakrishnan, Krause Jeanette A., Abe Manabu, Gudmundsdottir Anna D.	4. 巻 25
2. 論文標題 Light-Mediated Synthesis of 2-(4-Methoxyphenyl)-1-pyrroline via Intramolecular Reductive Cyclization of a Triplet Alkyl Nitrene	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 4345 ~ 4349
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.3c01476	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 Shirakawa Eiji, Ota Yuki, Yonekura Kyohei, Okura Keisho, Mizusawa Sahiro, Sarkar Sujan Kumar, Abe Manabu	4. 巻 9
2. 論文標題 Manipulation of an electron by photoirradiation in the electron-catalyzed cross-coupling reaction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eadh3544
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.adh3544	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 Nguyen Linh Tran Bao, Wu Cheng-Lin, Lin Tzu-Chau, Abe Manabu	4. 巻 87
2. 論文標題 Tris(4-Nitrophenyl)amine An Octupolar Chromophore with High Two-Photon Absorption Cross-Section and Its Application for Uncaging of Calcium Ions in the Near-Infrared Region	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 15888 ~ 15898
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.2c01987	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 Oyama Ryoko, Hayashi Ryuei, Abe Manabu	4. 巻 52
2. 論文標題 DMPO Spin Trapping Study of the Photolysis of 2-(4-Nitrophenyl)-1H-indolyl-3-methyl Derivatives	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 10 ~ 12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.220462	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 Liu Yuliang, Li Haoyu, Tan Eugene Yew Kun, Santiko Erik Budi, Chitose Youhei, Abe Manabu, Chiba Shunsuke	4. 巻 2
2. 論文標題 Pyrrolo[2,1-a]isoquinolines as multitasking organophotocatalysts in chemical synthesis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chem Catalysis	6. 最初と最後の頁 2726 ~ 2749
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.checat.2022.08.013	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 該当する

1. 著者名 Okamoto Kazunori, Hatano Sayaka, Abe Manabu	4. 巻 87
2. 論文標題 Thermal Reaction Behavior of Triphenylimidazolyl Radical with a Bulky Substituent	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 6877 ~ 6885
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.2c00672	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 Takano Ma-aya, Abe Manabu	4. 巻 24
2. 論文標題 Photoreaction of 4-(Bromomethyl)-7-(diethylamino)coumarin: Generation of a Radical and Cation Triplet Diradical during the C-Br Bond Cleavage	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 2804 ~ 2808
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.2c00694	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 Weragoda Geethika K., Abdelaziz Nayera M., Govorov Dmitrii, Merugu Rajkumar, Patton Leanna J., Grabo Jennifer E., Ranaweera R. A. A. Upul, Ratliff Anna C., Mendis W. Dinindu, Ahmed Noha, Vilinsky Katrin H., Abe Manabu, Baldwin Michael J., Gudmundsdottir Anna D.	4. 巻 127
2. 論文標題 Excited-State Intramolecular Proton Transfer in Salicylidene- $\alpha$ -Hydroxy Carboxylate Derivatives: Direct Detection of the Triplet Excited State of the cis-Keto Tautomer	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 2765 ~ 2778
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.3c00543	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 Lin Qianghua, Guo Runzhao, Hamao Kozue, Takagi Ryukichi, Abe Manabu	4. 巻 51
2. 論文標題 2-(4-Nitrophenyl)-1H-indolyl-3-methyl Chromophore: A Versatile Photocage that Responds to Visible-light One-photon and Near-infrared-light Two-photon Excitations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 153 ~ 156
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.210668	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 Liu Qian, Wang Zhe, Abe Manabu	4. 巻 87
2. 論文標題 Impacts of Solvent and Alkyl Chain Length on the Lifetime of Singlet Cyclopentane-1,3-diyl Diradicaloids with $\sigma$ -Single Bonding	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 1858 ~ 1866
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.1c02895	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 Wang Zhe, Murata Ryo, Abe Manabu	4. 巻 6
2. 論文標題 SOMO-HOMO Conversion in Triplet Cyclopentane-1,3-diyl Diradicals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 22773 ~ 22779
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c03125	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 Sarkar Sujjan K., Abe Manabu	4. 巻 86
2. 論文標題 Direct Detection of Singlet Cyclopentane-1,3-diyl Diradicals By Infrared and Ultraviolet/Visible Spectroscopy at Cryogenic Temperature and Their Photoreactivity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 12046 ~ 12053
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.1c01410	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 Wang Zhe, Yadav Pinky, Abe Manabu	4. 巻 57
2. 論文標題 Long-lived localised singlet diradicaloids with carbon-carbon $\sigma$ -single bonding (C- $\sigma$ -C)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 11301 ~ 11309
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CC04581D	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0件

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Research Group of Reaction Organic Chemistry  
<https://www.hiu-roc.com>  
The Research Group of Professor Dr. Manabu Abe  
<https://www.hiu-roc.com/>

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1件

国際研究集会 ICPOC-25	開催年 2022年～2022年
--------------------	--------------------

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
---------	---------