

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 4 月 9 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24550024

研究課題名(和文) グラフェンへの気体吸着による物性制御に関する理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical studies on electronic properties of graphene with molecular adsorption

研究代表者

川上 貴資 (Kawakami, Takashi)

大阪大学・理学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：30321748

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,200,000円

研究成果の概要(和文)：スピン物性に関する磁性パラメータ全て計算し、加えて電導性も算出した。さらに、これらを互いにカップリングさせることも行った。対象系は、閉殻、開殻芳香族環と系統的に広げて行き、分子内・分子間相互作用にも着目した。まず、酸素分子の吸着構造を解析するために、分子への吸着を取り扱った。どの効果が酸素分子存在下で電子物性を変化させているかを探究した。次に、有機ラジカルの一つであるフェナレニル分子を拡張して、フェナレニル二量体やゼトレンでの解析を進めた。これらは開殻一重項分子であり、三重項酸素を接触させた時、消失しているスピンの揺動を受けて出現した。最後に、電気伝導度の物性の算出を行った。

研究成果の概要(英文)：We carried out theoretical calculations for both all magnetic interaction and electric conductivity. Effective coupling between spin and conducting properties will cause newer point of views. The obtained systems were expanded from closed-shell to open-shell aromatic molecules with systematic procedures. Intra- and inter-molecular interaction were also taken into account. First, in order to study effects of adsorbed oxygen molecules, MO calculations for interacting system between molecule and oxygen were carried out. Second, phenalenyl-dimer and zethrene were employed as extended systems. Such open-singlet species can show novel spin properties with interacting oxygen molecules. Finally, electric conductivity was also carried out.

研究分野：量子化学

キーワード：グラフェン 酸素吸着 スピントロニクス 磁性 強相関電子系 分子軌道法 フェナレニル ゼトレン

## 1. 研究開始当初の背景

その歴史は 50 年来と非常に古いのではあるが、この最近 5 年ほどで急速に活気づいてきた研究分野に「グラフェン」がある。その勃興を象徴する出来事が、ノーベル物理学賞 (A.K.Gem, K.S.Novosebv) である。彼らの直接の受賞理由は、粘着テープによるグラファイトの剥離による非常にシンプルかつ革新的なグラフェンの作成実験の発見と、この分野への動機付けである。この単層グラフェンに関しては、非常に興味深い電子物性が期待される。特徴的には、その電子が「質量 0 のディラック粒子」となることで電子の移動度が驚くほど高くなることであり、次世代のエレクトロニクス材料として期待される。またもし、無限サイズではなく端構造を有する有限サイズとなり、炭素構造がナノメータスケールの微少素片になった場合には、その端(エッジ)では磁性スピンの局所磁性が生じ、ある条件下では平坦バンド強磁性が期待される。この様な単層グラフェンへのアプローチとして、我々は理論的に、特に分子軌道法に立脚した我々の開発系に関する手法を改良して適用する。

ただ、何の不純物も含まない単層グラフェンは、理想的ではあるが、実際には現実的ではなく、さまざまな外部因子を導入したほうがより現実的である。更により積極的にこの外部因子を電子物性の改良や制御に用いることが重要となってくる。これらの事に関して、先に東京工業大学の榎教授らの研究室では、様々な実験的な試みが行われている。その一つに、グラフェンに気体分子を積極的に曝露して、そのグラフェンの物性(光学物性・電子物性・磁性)を測定する研究がある。例えば、基底三重項状態である酸素分子はグラフェンに吸着したときに、有機電界効果トランジスタ構造にセットアップされたグラフェンの電気伝導を制御することができると、報告されている。しかし、窒素分子等の他種の気体分子ではその特異な制御は観測されないというものである。

## 2. 研究の目的

グラフェンに関する我々の理論計算によるアプローチでは、

まず、(1) 酸素分子の吸着構造の解析を行う。グラフェン表面への吸着を考える場合、成功を修めた我々の研究「エチレン骨格への酸素分子のジオキセタン中間体を介する付加反応の理論的研究」が関係深い。これはホルタルのルシフェリンを代表する化学発光などでの基礎解析に深く貢献した。この結果の意味するところは、炭素間二重結合( $C=C$ )に一重項酸素分子が付加することが可能であり、その過程で分子軌道の組み替え

やエネルギーの授受が行われる、ということである。これをグラフェン系に適応した場合でも、軌道相関図による定性的議論でも、酸素分子の吸着が予想され、実際のプロトタイプの定量的計算でも、炭素間  $\pi$  共役結合 ( $C-C$ ) へは一重項酸素が、近距離で吸着することが判明した。また、フェニル炭素骨格 ( $\beta$  回軸) では二重項であるので、酸素分子の吸着がより容易になる。

次に、(2) 電気伝導度の算出を行う。電気伝導の測定値は実験により直接観測が可能である数値であるため、我々の計算の妥当性が直接的に評価できる。これに関係して、我々は既に電気伝導率を算出するための基礎的な理論開発とプログラム開発は終えており、その改良が本研究で行われることとなる。具体的には、ランダウアー公式を弾性散乱グリーン関数にて扱った伝導率計算プログラムを開発して、既に当研究室にて「DNA 金属系での電気伝導度の計算」などで実績を積んできた。ここで実際の分子の形状情報が分子軌道法計算により繰り込まれるため、系の状態を完全に反映した計算値を算出することが出来る。

## 3. 研究の方法

まず、単層グラフェンに気体分子を積極的に曝露して、そのグラフェンの電子物性の変化を理論計算にて解析するために、酸素分子をグラフェンに吸着したときの影響を調べる。酸素分子の吸着構造の解析に関して注力する。特に、グラフェンの表面への吸着を取り扱う。これらの計算では、酸素分子を扱うためにその量子化学計算では電子スピンの考慮が必要であり開設計算を行う。また、分子間距離(グラフェンの炭素原子と酸素分子の酸素原子)が約  $1.5 \text{ \AA}$  前後の化学吸着領域であり、開設計算に特有なスピンコンタミネーションを取り除くのが必須である。これらに関しては、現在までの我々のスピン射影(AP)法により改善が図られており、より正確な計算が実行可能である。具体的な計算では、無限サイズの単層グラフェンを分子軌道計算をするには困難であるし、周期境界条件やバンド計算でのアプローチでは、酸素分子との近接的な相互作用に関しての情報が欠落してしまうので、大胆にモデル分子を採用して計算を行う。そのためには、最も簡単な  $\pi$  共役芳香族分子としてベンゼンをまず採用して、電子相関が十二分に取り込んだ計算手法、例えば、CC(Coupled-Cluster) 法や CAS(Complete Active Space) 法や究極的には CAS-CC 法を十分な基底関数で行い、その構造最適化により化学吸着した状態での構造を探索する。また、ここでの構造歪みは安定化に大きく寄与するが、無限系グラフェンとの結果の解離を補完するために、ナフタレンやピレンなどの分子でも、構造歪み

に関して議論する。特にピレンに関しては、一重項ビラジカル(Singlet Biradical)構造であるために、スピンとの関係でも興味深い。最終的には、どの効果が酸素分子存在下でのグラフェンの電子物性を変化させているかを探究する。最も簡単には酸素からグラフェンへの部分的な電荷移動が考えられるが、加えて、酸素分子とグラフェン間の分子軌道の相互作用や、酸素分子のスピンの影響なども解析する。吸蔵分子として窒素分子などで比較計算を行い、酸素分子の特異性を見極める。

次に、これまでに判明した酸素分子の吸蔵構造を用いて、(2) 電気伝導度の算出を行う。この測定値は実験により直接観測が可能である数値であるため、我々の計算の妥当性が直接的に評価できる。これに関係して、我々は既に電気伝導率を算出するための基礎的な理論開発とプログラム開発は終えており、その改良が本研究で行われることとなる。具体的には、ランダウアー公式を弾性散乱グリーン関数にて扱った伝導率計算プログラムを開発している。現在までの取り扱いではスピンの考慮が全くされていない閉殻系での計算を行うに留まっているが、これをスピンの影響を自由に勘案できる開殻系での計算が可能とするように改良する。市販の同類のソフトウェアとしての「ATK」(非平衡グリーン関数により閉殻系のみ計算可能)等も導入し計算結果を比較する。

#### 4. 研究成果

単層グラフェンに気体分子を積極的に曝露して、そのグラフェンの電子物性の変化を理論計算にて解析するために、酸素分子をグラフェンに吸着したときの影響を調べた。まず、酸素分子の吸着構造の解析に関して、グラフェンの表面への吸着を取り扱った。取り扱った系は、簡単な $\pi$ 共役芳香族分子を採用して、電子相関が十二分に取り込んだ計算手法を行い、その構造最適化により化学吸着した状態での構造を探索した。構造歪みは安定化に大きく寄与するが、無限系グラフェンとの結果の解離を補完するために、ナフタレンやピレンやフェナレニルなどの分子でも、構造歪みに関して議論した。特にフェナレニルに関しては、ラジカルであるために、スピンとの関係でも興味深い。最終的には、どの効果が酸素分子存在下でのグラフェンの電子物性を変化させているかを探究した。酸素分子とグラフェン間の分子軌道の相互作用や、酸素分子のスピンの影響なども解析した。吸蔵分子として窒素分子などで比較計算を行い、酸素分子の特異性を見極めた。

次に、有機ラジカルの一つであるフェナレニル分子を拡張して、フェナレニル二量体やゼトレンでの解析を進めた。特に、前

者は空間的なスピン間相互作用が、後者は分子内のスピン間相互作用が特徴的である。これらは、開殻一重項分子であり、全体のスピン多重度は一重項であるものの、そのスピン間の結合状態が開殻的であり、非常に興味深い性質を示した。例えば、開殻性を定量的に示すケミカルインデックスを算出を通じて、この系の本質に迫った。これらの分子に、三重項酸素を接触させた場合、分子内で打ち消しあっているスピンの、酸素の揺動を受けて、スピン密度が出現し、その性質を発現してることが判明した。

最後に、さらに電気伝導率などの物性の算出を行った。我々は既に電気伝導率を算出するための基礎的な理論開発とプログラム開発は終えており、その改良が本研究で行われることとなった。ランダウアー公式を弾性散乱グリーン関数にて扱った伝導率計算プログラムにて行った。現在までの取り扱いではスピンの考慮が全くされていない閉殻系での計算を行うに留まっているが、これをスピンの影響を自由に勘案できる開殻系に適用した。また、市販の同類のソフトウェアとしての「ATK」(非平衡グリーン関数による)等も導入し、計算を実行した。それらの数値は、実験により直接観測が可能である数値であるため、我々の計算の妥当性が直接的に評価できた。例えば、森田らから新規に合成して測定結果などを発表している TOT 誘導体の分子性結晶、例えば  $\text{Br}_3\text{TOT}$  や  $(t\text{-Bu})_3\text{TOT}$  は、今までにない物性を発現することが報告されており、非常に興味深かった。

以上の研究を通じて、スピン物性を様々な磁性パラメータを第一原理計算で全て計算すること、および、電導性に関する物性を同じく第一原理計算で計算することを、互いにカップリングさせることが可能となった。対象とした系は、グラフェンから始めて、閉殻芳香族環、開殻芳香族環(有機ラジカル)と系統的に広げて行き、さらにこれらの分子内・分子間での相互作用にも着目した現象に研究を押し進めることが出来た。

#### 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 26 件)

(1) Keiji Kinoshita, Takashi Kawakami, Shohei Yoshimura, Toru Saito, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, Kizashi Yamaguchi, Theoretical Study of Electronic Properties of Phenalenyl Radical and Zethrene Diradical Species : Possibility of Triplet Oxygen Adsorption onto Graphene Surface, Bull. Chem. Soc. Jpn., 88 (2015) 149-161, 査読有

(2) Hironori Yamaguchi, Hirotsugu Miyagai, Tokuro Shimokawa, Kenji Iwase, Toshio Ono, Yohei Kono, Naoki Kase, Koji Araki, Shunichiro

- Kittaka, Toshiro Sakakibara, Takashi Kawakami, Kouichi Okunishi, Yuko Hosokawa, Fine-Tuning of Magnetic Interactions in Organic Spin Ladders, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 83 (2014) 033707, 査読有
- (3) Kohei Tada, Kohei Sakata, Satoru Yamada, Kazuyuki Okazaki, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, DFT calculations for Au adsorption onto a reduced TiO<sub>2</sub> (110) surface with the coexistence of Cl, *Mol. Phys.*, 112 (2014) 365-378, 査読有
- (4) Kohei Sakata, Kohei Tada, Satoru Yamada, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, DFT calculations for aerobic oxidation of alcohols over neutral Au<sub>6</sub> cluster, *Mol. Phys.*, 112 (2014) 385-392, 査読有
- (5) Y. Kitagawa, T. Kawakami, S. Yamanaka and M. Okumura, DFT and DFT-D studies on molecular structure of double-decker phthalocyaninato-terbium(III) complex, *Mol. Phys.*, 112 (2014) 995-1001, 査読有
- (6) Sachio Hayashi, Kohei Tada, Kohei Sakata, Hiroaki Koga, Shusuke Yamanaka, Takashi Kawakami, Yasutaka Kitagawa, Mitsutaka Okumura, Theoretical Investigation on the Optical Properties of Diphosphine-protected Au<sub>8</sub> Cluster Complexes, *Chem. Lett.*, 43 (2014) 880-882, 査読有
- (7) K. Yamaguchi, S. Yamanaka, M. Shoji, H. Isobe, Y. Kitagawa, T. Kawakami, S. Yamada, M. Okumura, Theory of chemical bonds in metalloenzymes XIX: labile manganese oxygen bonds of the CaMn<sub>4</sub>O<sub>5</sub> cluster in oxygen evolving complex of photosystem II, *Mol. Phys.*, 112 (2014) 485-507, 査読有
- (8) Mitsutaka Okumura, Yasuyuki Nakanishi, Keiji Kinoshita, Satoru Yamada, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Shusuke Yamanaka, Toru Amaya, Toshikazu Hirao, Theoretical Investigation for the Stability of the Concave-Bound Cyclopentadienyl Iron Complex of Sumanene, *Inter. J. Quant. Chem.*, 113 (2013) 437-442, 査読有
- (9) Shusuke Yamanaka, Kyohei Komi, Koki Ueda, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Mitsutaka Okumura, Haruki Nakamura, Kizashi Yamaguchi, Ab initio DFT study of magneto-structural correlation of dinuclear mixed-valence Mn complexes., *J. Phys. Conf. Ser.* 428 (2013) 012035(1-7), 査読有
- (10) Hironori Yamaguchi, Shintaro Nagata, Masami Tada, Kenji Iwase, Toshio Ono, Sadafumi Nishihara, Yuko Hosokoshi, Tokuro Shimokawa, Hiroki Nakano, Hiroyuki Nojiri, Akira Matsuo, Koichi Kindo, Takashi Kawakami, Crystal structure and magnetic properties of honeycomb-like lattice antiferromagnet p-BIP-V<sub>2</sub>, *Phys. Rev. B* 87 (2013) 125120(1-8), 査読有
- (11) Hironori YAMAGUCHI, Asano TOHO, Kenji IWASE, Toshio ONO, Takashi KAWAKAMI, Tokuro SHIMOKAWA, Akira MATSUO, and Yuko HOSOKOSHI, Two-Dimensional Honeycomb Lattice Consisting of a New Organic Radical 2-Cl-6-F-V, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 82 (2013) 043713(1-5), 査読有
- (12) H. Yamaguchi, K. Iwase, T. Ono, T. Shimokawa, H. Nakano, Y. Shimura, N. Kase, S. Kittaka, T. Sakakibara, T. Kawakami, Y. Hosokoshi, Unconventional Magnetic and Thermodynamic Properties of S<sub>1</sub>=2 Spin Ladder with Ferromagnetic Legs, *Phys. Rev. Lett.*, 110 (2013) 157205(1-5), 査読有
- (13) Yasutaka Kitagawa, Toru Matsui, Yasuyuki Nakanishi, Yasuteru Shigeta, Takashi Kawakami, Mitsutaka Okumura and Kizashi Yamaguchi, Theoretical studies of electronic structures, magnetic properties and electron conductivities of one-dimensional Ni<sub>n</sub> (n = 3, 5, 7) complexes, *Dalton Trans.*, 42 (2013) 16200-16208, 査読有
- (14) Y. Kitagawa, N. Yasuda, H. Hatake, T. Saito, Y. Kataoka, T. Matsui, T. Kawakami, S. Yamanaka, M. Okumura, and K. Yamaguchi, Combination of Approximate Spin-Projection and Spin-Restricted Calculations Based on ONIOM Method for Geometry Optimization of Large Biradical Systems, *Int. J. Quant. Chem.*, 113 (2013) 290-295, 査読有
- (15) Yasutaka Kitagawa, Toru Matsui, Natsumi Yasuda, Hiroshi Hatake, Takashi Kawakami, Shusuke Yamanaka, Masayuki Nihei, Mitsutaka Okumura, Hiroki Oshio, Kizashi Yamaguchi, DFT calculations of effective exchange integrals at the complete basis set limit on oxo-vanadium ring complex, *Polyhedron*, 66 (2013) 97-101, 査読有
- (16) Kohei Tada, Kohei Sakata, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, DFT calculations for chlorine elimination from chlorine-adsorbed gold clusters by hydrogen, *Chem. Phys. Lett.* 579 (2013) 94-99, 査読有
- (17) Yusuke Kataoka, Yasutaka Kitagawa, Takashi Kawakami, Mitsutaka Okumura, Photophysical properties of mono- and di-nuclear platinum(II) complexes with the tridentate ligand 2-phenyl-6-(1H-pyrazol-3-yl)-pyridine: A DFT and TDDFT study, *J. Orgmet. Chem.*, 743 (2013) 163-169, 査読有
- (18) K. Yamaguchi, M. Shoji, H. Isobe, Y. Kitagawa, S. Yamada, T. Kawakami, S. Yamanaka, M. Okumura, Theory of chemical bonds in metalloenzymes XVI. Oxygen activation by high-valent transition metal ions in native and artificial systems, *Polyhedron*, 66 (2013) 228-244, 査読有
- (19) S. Yamanaka, K. Kanda, T. Saito, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Ehara, M. Okumura, H. Nakamura, K. Yamaguchi, Does B3LYP

correctly describe magnetism of manganese complexes with various oxidation numbers and various structural motifs?, Chem. Phys. Lett., 519-520 (2012) 134-140, 査読有

(20) S. Yamanaka, K. Kanda, T. Saito, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Ehara, M. Okumura, H. Nakamura, K. Yamaguchi, Density Functional Study of Manganese Complexes: Protonation Effects on Geometry and Magnetism, Prog. Theo. Chem. Phys., 26 (2012) 461-473, 査読有

(21) Y. Kitagawa, T. Saito, Y. Kataoka, Y. Nakanishi, T. Matsui, T. Kawakami, M. Okumura, and K. Yamaguchi, Vibrational frequency without spin contamination error - Approximately spin projected force constant -, AIP Conf. Proc. 1504 (2012) 879-882, 査読有

(22) N. Yasuda, Y. Kitagawa, H. Hatake, T. Saito, Y. Kataoka, T. Matsui, T. Kawakami, S. Yamanaka, M. Okumura and K. Yamaguchi, Approximate spin projection for geometry optimization of biradical systems : Case studies of through-space and through-bond systems, Prog. Theo. Chem. Phys., 26 (2012) 345-359, 査読有

(23) T. Saito, M. Shoji, K. Kanda, H. Isobe, S. Yamanaka, Y. Kitagawa, S. Yamada, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Theory of Chemical Bonds in Metalloenzymes. XVII. Symmetry Breaking in Manganese Cluster Structures and Chameleonic Mechanisms for the O-O Bond Formation of Water Splitting Reaction, Int. J. Quant. Chem., 112 (2012) 121-135, 査読有

(24) T. Saito, A. Ito, T. Watanabe, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Performance of the coupled cluster and DFT methods for through-space magnetic interactions of nitroxide dimer, Chem. Phys. Lett., 542 (2012) 19-25, 査読有

(25) K. Kanda, S. Yamanaka, T. Saito, Y. Kitagawa, T. Kawakami, M. Okumura, K. Yamaguchi, Calculation of Magnetic Properties and Spectroscopic Parameters of Manganese Clusters with Density Functional Theory, Prog. Theo. Chem. Phys, 26 (2012) 449-460, 査読有

(26) K. Yamaguchi, M. Shoji, T. Saito, H. Isobe, S. Yamada, S. Nishihara, T. Kawakami, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, M. Okumura, Theory of chemical bonds in metalloenzymes - Manganese oxydes clusters in the oxygen evolution center -, AIP Conf. Proc. 1504 (2012) 63-79, 査読有

[学会発表] (計 61 件)

(1) 川上貴資・木下啓二・山中秀介・奥村光隆・庄司光男・鷹野優・山口兆, 有機スピン系の電子状態と磁氣的相互作用の解析に関する DMRG DMRG-CAS 手法の評価, 日本化学会春季年会, 2015.3.26-29, 日大船橋

(2) 木下啓二・川上貴資・齋藤徹・山中秀介・奥村光隆, TOT ダイマーの磁氣的相互作用に関する理論研究, 日本化学会春季年会, 2015.3.26-29, 日大船橋

(3) 川上貴資, 木下啓二, 齋藤徹, 北河康隆, 山中秀介, 山口兆, 奥村光隆, 単核錯体の零磁場分裂定数  $D$  の分子軌道法による算出と多変量解析による解析, 分子科学討論会, 2014.9.21-24, 広大

(4) 木下啓二, 川上貴資, 北河康隆, 山中秀介, 奥村光隆, TOT ダイマーの磁氣的相互作用と電気伝導性に関する理論研究, 分子科学討論会, 2014.9.21-24, 広大

(5) 川上貴資・吉村翔平・木下啓二・北河康隆・山中秀介・山口兆・奥村光隆, 零磁場分裂定数  $D$  の分子軌道法による算出と新規単分子磁石への指針, 日本化学会春季年会, 2014.3.27-30, 名大

(6) 木下啓二・川上貴資・吉村翔平・北河康隆・山中秀介・奥村光隆, 弾性散乱 Green 関数法を用いた開殻一重項分子系の化学修飾による電子物性の変化に関する理論的研究, 日本化学会春季年会, 2014.3.27-30, 名大

(7) T. Kawakami, K. Kinoshita, S. Yoshimura, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, K. Yamaguchi, M. Okumura, Theoretical calculations of zero-field splitting parameter  $D$  for single molecular magnets, 日本チェコ理論化学, 2013.12.2-6, 奈良

(8) Takashi Kawakami, Keiji Kinoshita, Shohei Yoshimura, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka, Kizashi Yamaguchi, Mitsutaka Okumura, Theoretical calculations of zero-field splitting parameter  $D$  for single molecular magnets, 第7回日露WS, 2013.11.17-20, 淡路

(9) Keiji Kinoshita, Takashi Kawakami, Shohei Yoshimura, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, The Electronic Conductivity of Zethrene as Open-Singlet Molecule by Green's Function Based Elastic Scattering Theory, 第7回日露WS, 2013.11.17-20, 淡路

(10) S. Yoshimura, T. Kawakami, K. Kinoshita, Y. Kitagawa, S. Yamanaka, M. Okumura, Theoretical investigations of the magnetic properties in the  $Mn12O12$  single-molecule magnets, 第7回日露WS, 2013.11.17-20, 淡路

(11) 吉村翔平・北河康隆・木下啓二・川上貴資・山中秀介・奥村光隆, テルビウムーフタロシアニン二層型錯体の磁氣的性質に関する理論的研究, 錯体討論会, 2013.11, 沖縄

(12) 川上貴資, 木下啓二, 吉村翔平, 北河康隆, 山中秀介, 山口兆, 奥村光隆, 単分子磁石の零磁場分裂定数  $D$  の分子軌道法による算出, 分子科学討論会, 2013.9.24-27, 京都

(13) 木下啓二, 川上貴資, 吉村翔平, 北河康隆, 山中秀介, 奥村光隆, 芳香族炭化水素への酸素吸着と電気伝導への影響, 分子科学討論会, 2013.9.24-27, 京都

(14) 吉村翔平, 木下啓二, 川上貴資, 北河康隆, 山中秀介, 奥村光隆, 単分子磁石  $Mn12O12$  のゼロ磁場分裂に関する理論的研究, 分子科学討論会, 2013.9.24-27, 京都

(15) Takashi Kawakami, Keiji Kinoshita, Shohei Yoshimura, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka, Kizashi Yamaguchi, Mitsutaka Okumura, Theoretical studies of O<sub>2</sub> molecule arrangement as radical spin by benzene-ring interaction, RPGR2013, 2013.9.9-13, 東工大

(16) Keiji Kinoshita, Takashi Kawakami, Shohei Yoshimura, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, Theoretical studies on electronic conductivity of aromatic hydrocarbons as models of graphene using Green's functionbased elastic scattering theory, RPGR2013, 2013.9.9-13, 東工大

(17) 伊藤章・川上貴資・木下啓二・吉村翔平・北河康隆・山中秀介・奥村光隆, 分子磁性体 Pd(dmit)<sub>2</sub> にラマン・IR スペクトルに関する分子軌道法を用いた解析, 理論化学討論会, 2013.5.16-17, 福岡

(18) 木下啓二・川上貴資・伊藤章・吉村翔平・北河康隆・山中秀介・奥村光隆, フェナレニル骨格を持つ芳香族炭化水素の電気伝導性に関する理論研究, 理論化学討論会, 2013.5.16-17, 福岡

(19) 吉村翔平・伊藤章・木下啓二・川上貴資・北河康隆・山中秀介・奥村光隆, 金属錯体のゼロ磁場分裂定数 D の分子軌道法による計算, 理論化学討論会, 2013.5.16-17, 福岡

(20) 川上貴資・木下啓二・伊藤章・吉村翔平・北河康隆・山中秀介・山口兆・奥村光隆, 単分子磁石の零磁場分裂定数 D の分子軌道法による算出とその寄与分類, 日本化学会春季年会, 2013.3.22-25, 立命大草津

(21) 木下啓二・川上貴資・伊藤章・吉村翔平・北河康隆・山中秀介・奥村光隆, フェナレニル骨格を持つ芳香族炭化水素の電気伝導性に関する理論研究, 日本化学会春季年会, 2013.3.22-25, 立命大草津

(22) 伊藤章・木下啓二・吉村翔平・川上貴資・北河康隆・山中秀介・奥村光隆, 分子磁性体 Pd(dmit)<sub>2</sub> のラマン・IR スペクトルに関する分子軌道法を用いた解析, 日本化学会春季年会, 2013.3.22-25, 立命大草津

(23) 吉村翔平・木下啓二・伊藤章・川上貴資・北河康隆・山中秀介・奥村光隆, 単核錯体のゼロ磁場分裂定数 D の分子軌道法による計算, 日本化学会春季年会, 2013.3.22-25, 立命大草津

(24) 川上貴資, 木下啓二, 伊藤章, 吉村翔平, 北河康隆, 山中秀介, 山口兆, 奥村光隆, 単分子磁石の零磁場分裂定数 D の分子軌道法による算出, グランドチャレンジ, 2013.3.11, 東大

(25) Keiji Kinoshita, T. Kawakami, Theoretical studies of electronic conductivity of aromatic hydrocarbons using green's function-based elastic scattering theory, Sanibel Symp., 2013.2.17-22, フロリダ

(26) Keiji Kinoshita, Akira Ito, Shohei Yoshimura, Takashi Kawakami, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka

Okumura, Theoretical Studies on the interaction of Oxygen Molecule to Graphene and Aromatic Hydrocarbons, ICMM2012, 2012.10.7-11, オールランド

(27) 川上貴資, 木下啓二, 伊藤章, 吉村翔平, 北河康隆, 山中秀介, 山口兆, 奥村光隆, 単分子磁石の零磁場分裂定数 D の分子軌道法による算出, 分子科学討論会, 2012.9.18-21, 東大

(28) 木下啓二, 伊藤章, 吉村翔平, 川上貴資, 北河康隆, 山中秀介, 奥村光隆, ラジカル性を持つ芳香族炭化水素への酸素分子への吸着に関する理論研究, 分子科学討論会, 2012.9.18-21, 東大

(29) 伊藤章, 木下啓二, 吉村翔平, 川上貴資, 山中秀介, 北河康隆, 奥村光隆, 分子磁性体 Pd(dmit)<sub>2</sub> のラマン・IR スペクトルに対する分子軌道法を用いた考察, 分子科学討論会, 2012.9.18-21, 東大

(30) 吉村翔平, 中島諒, 伊藤章, 木下啓二, 川上貴資, 北河康隆, 山中秀介, 奥村光隆, ゼロ磁場分裂定数 D の分子軌道法による計算, 分子科学討論会, 2012.9.18-21, 東大

(31) Keiji Kinoshita, Akira Ito, Shohei Yoshimura, Takashi Kawakami, Yasutaka Kitagawa, Shusuke Yamanaka, Mitsutaka Okumura, Theoretical Studies on Adsorption of Oxygen Molecules onto Phenalenyl and its Derivatives as Radical Aromatic Hydrocarbons, ICQC, 2012.6.25-30, Colorado

(32) 木下・川上・北河・山中・奥村, グラフェン及び芳香族炭化水素への酸素分子の相互作用に関する理論研究, ナノ学会, 2012.6.14-16, 阪大

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

川上 貴資 (KAWAKAMI TAKASHI)

研究者番号 : 30321748

### (2)研究分担者

( )

研究者番号 :

### (3)連携研究者

( )

研究者番号 :