

令和 2 年 8 月 18 日現在

機関番号：11501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2019

課題番号：15K05445

研究課題名(和文) T項を基底項とする遷移金属多核錯体の磁気解析と磁気異方性制御

研究課題名(英文) Magnetic analysis and anisotropy control of polynuclear T-ground-term transition metal complexes

研究代表者

崎山 博史 (Sakiyama, Hiroshi)

山形大学・理学部・教授

研究者番号：20253396

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：磁性現象のシミュレーションは、物質の基本性質を知る上で重要な技術であるが、特定の磁気中心(T項磁気中心)が多数組み合わせられた物質(T項多核錯体)ではシミュレーションは困難を極める。本研究では、T項多核錯体を対象に、磁性シミュレーションをおこなうことを目的とした。成果として、これまで未導出であったT項磁気中心の基本方程式をすべて文字式の形で解き、それらを組み合わせて磁性現象の理論式を導出することで、カゴメ格子型二次元ポリマーをはじめとする困難な磁気解析に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

磁性シミュレーションは、スピントロニクスとも関連した重要な技術の一つであるが、T項多核錯体ではシミュレーションは困難を極める。本研究では、一つのT項磁気中心について、行列方程式を文字式の形で解き、これを組み合わせることでT項多核錯体用の磁性理論式を導出した点が特徴である。この方法によって大幅な計算コストの節約ができ、これまで不可能であったT項一次元ポリマーやT項二次元ポリマーの磁気シミュレーションに成功した点に学術的意義がある。

研究成果の概要(英文)：Simulating magnetic properties is an important technique for understanding the basic properties of materials; however, the simulation is extremely difficult for polynuclear T-term complexes, possessing a lot of T-term magnetic centers. In this study, a purpose is to conduct magnetic simulations for polynuclear T-term complexes. All the secular matrices were solved for the T-term magnetic centers, and the theoretical equations were derived for the polynuclear T-term complexes. As a result, difficult magnetic properties were successfully simulated for polynuclear T-term complexes.

研究分野：錯体化学

キーワード：磁性 シミュレーション T項 多核錯体

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

(1)  ${}^4T_1$  項を基底項に持つコバルト(II)錯体について、従来の方法では  $n$  核錯体の磁気シミュレーションのために、 $12^n \times 12^n$  の大きな永年行列方程式を解く必要があり、大きな多核錯体のシミュレーションは事実上不可能であった。近似を用いた方法を含めて、単核、二核、三核、四核錯体の磁気解析がおこなわれていたが、それ以上の核数を持つ多核錯体やポリマー錯体については解析例がなかった。

(2) 多核 T 項基底錯体の磁气的性質は、単核錯体のゼーマンエネルギーを用いて表現可能であることが多い。この方法を用いた磁気シミュレーションは、核数の多い多核 T 項基底錯体において有利であるが、d 元素単核金属錯体の 4 つの T 項 ( ${}^2T_2$  項、 ${}^3T_1$  項、 ${}^4T_1$  項、 ${}^5T_2$  項) のうち、 ${}^3T_1$  項と  ${}^5T_2$  項については永年行列方程式が解かれておらず、ゼーマンエネルギーの式が得られていなかった。このため、 ${}^3T_1$  項や  ${}^5T_2$  項を基底項とする金属イオンを多数含む金属錯体の磁気解析は非常に大きな永年行列式を解かねばならず、事実上不可能であった。

### 2. 研究の目的

(1) 本研究の目的の一つは、d 元素単核金属錯体の 4 つの T 項 ( ${}^2T_2$  項、 ${}^3T_1$  項、 ${}^4T_1$  項、 ${}^5T_2$  項) のうち、永年行列方程式がまだ解かれていない  ${}^3T_1$  項と  ${}^5T_2$  項について、文字式の形で解を得、ゼーマンエネルギーの式を得ることである。さらに導出したゼーマンエネルギーの式を用いて磁化率・磁化のシミュレーションソフトウェアを開発し、磁気解析に用いることである。

(2) 本研究のもう 1 つの目的は、T 項基底錯体の中で特にスピン軌道相互作用の影響が大きい高スピニコバルト(II)錯体を中心に、多核錯体ならびに種々のポリマー錯体について、磁化率・磁化の理論式導出、シミュレーションソフトウェアの開発をおこない、磁気解析を実施することである。

### 3. 研究の方法

(1)  ${}^3T_1$  項と  ${}^5T_2$  項の永年行列方程式を解くにあたっては、スピン軌道相互作用、アキシャル配位子場を考慮したハミルトニアンから永年行列方程式を導き、解の形を予測して新しいパラメータを導入することで行列方程式を解きやすくした。解となるゼーマンエネルギーは文字式で表した。

(2) ソフトウェア開発には、初期は REALBasic を用いていたが、Windows10 でも動作させるため、XOJO に切り替えた。

### 4. 研究成果

(1) これまで永年行列方程式が解かれていなかった  ${}^3T_1$  項と  ${}^5T_2$  項を基底項とする単核錯体について永年行列方程式を解き、ゼーマンエネルギーの式を得ることができた[ ]。また、ゼーマンエネルギーの式を用いて磁化率と磁化の式を記述した。さらに、これらの理論式を扱うことができるコンピュータソフトウェア MagSaki3T1 と MagSakiFeII を開発し、 ${}^3T_1$  項と  ${}^5T_2$  項を基底項とする錯体の磁気解析を高速に実施できるようになった。今回導出したゼーマンエネルギーの式を用いることで、多核錯体の磁気解析も可能になる。

(2)  ${}^4T_1$  項を基底項とする三核コバルト(II)錯体および四核コバルト(II)錯体の磁化率・磁化の解析ができるコンピュータソフトウェア MagSaki(Tri)および MagSaki(Tetra)を開発した[ ]。前者は、正三角形型、二等辺三角形型、直線型など種々の構造を持つ三核コバルト(II)錯体の磁化率、磁化のシミュレーションや磁化率・磁化同時フィッティングなどができる。後者は、正四面体型、正方形型、平行四辺形型など種々の構造を持つ四核コバルト(II)錯体について、前者同様、種々の磁気解析ができる。

(3) (2)に記載のコンピュータソフトウェア MagSaki(Tri)および MagSaki(Tetra)を用いることで、三核コバルト(II)錯体および四核コバルト(II)錯体について、磁化率・磁化同時フィッティングによる磁気解析に成功した[ ]。磁気解析の結果、前者では三核ユニット内のコバルト(II)イオン間に反強磁性的相互作用と強磁性的相互作用が混在していると考えられる。また後者では、バタフライ型四核ユニット内のコバルト(II)イオン間に強磁性的相互作用が働いていることが分かった。

(4)  ${}^4T_1$  項を基底項とするコバルト(II)イオンが一次元鎖状構造に連なった錯体や、種々の二次元構造を形作る錯体についても理論式を導出した。ポリマー構造での特段の成功例は、直線状三核コバルト(II)錯体が二次元カゴメ格子状につながった二次元錯体の磁気解析であった[ ]。解析の結果、この錯体の直線型三核ユニット内に強磁性的相互作用が見られ、カゴメ格子平面内には反強磁性的相互作用が見られた。

(5) その他、コバルト(II)イオンのポリマー錯体の磁気解析を実施した。多くの場合、構造的にはポリマーであっても、磁気的には独立した少数核構造となっているものが多いことが分かった[ , , など]。ここの示すものは、それぞれ三核コバルト(II)錯体、五核コバルト(II)錯体、二核コバルト(II)錯体、二核コバルト(II)錯体として解釈できた。

(6) 単結晶偏極中性子回折と単結晶磁気解析により、単核コバルト(II)錯体および二核コバルト(II)錯体の磁気異方性について測定した[ ]。単核錯体で三回軸方向に磁化容易軸があることなど磁気異方性に関する情報が得られたほか、磁化率と磁化の異方性シミュレーションにも成功し、パウダー試料の実測値を再現することにも成功した。

(7) 正八面体型高スピンコバルト(II)錯体の磁気解析において、従来アキシャル対称による解釈が主流であったが、ロンビック対称での磁気解析に成功した[ ]。基底関数を変換し、ロンビック対称の永年行列方程式を簡略化した点に学術的意義がある。

(8) 正八面体型構造からのひずみが大きい場合、基底項の分裂によって生じた項だけでなく、励起項から生じた項が磁性に影響を与える場合がある。このような場合を想定して、 $d^1$ 電子配置の基底  ${}^2T_2$  項と励起  ${}^2E$  項の分裂を考慮した理論式を導出し、磁気解析にも成功した[ ]。

#### <文献>

- Hiroshi Sakiyama, Theoretical equations of Zeeman energy levels for distorted metal complexes with  ${}^3T_1$  ground terms, *Magnetochemistry*, 2019, 5, 17 (10 pages).
- Hiroshi Sakiyama, Theoretical equations of Zeeman energy levels for distorted metal complexes with  ${}^5T_{2g}$  ground terms, *J. Math. Chem.*, 2019, 57, 858-874.
- Hiroshi SAKIYAMA, Development of MagSaki(Tri) Software for the Magnetic Analysis of Trinuclear High-spin Cobalt(II) Complexes, *J. Comput. Chem. Jpn. Int. Ed.*, 2015, 1, 9-13.
- Hiroshi SAKIYAMA, Development of MagSaki(Tetra) Software for the Magnetic Analysis of Tetranuclear High-spin Cobalt(II) Complexes, *J. Comput. Chem. Jpn. Int. Ed.*, 2016, 2, 1-4.
- Tatsuya Maruyama, Yuji Kikukawa, Hiroshi Sakiyama, Misaki Katayama, Yasuhiro Inada and Yoshihito Hayashi, A highly-flexible cyclic-decavanadate ligand for interconversion of dinuclear- and trinuclearcobalt(II) and manganese(II) cores, *RSC Adv.*, 2017, 7, 37666-37674.
- Megumi Yoshitake, Momoko Nishihashi, Yasumasa Ogata, Ko Yoneda, Yasunori Yamada, Hiroshi Sakiyama, Akio Mishima, Masaaki Ohba, Masayuki Koikawa, Syntheses, Structures, and Magnetic Properties of Cubane-Based Cobalt and Nickel Complexes with ONO-Tridentate Ligands, *Polyhedron*, 2017, 136, 136-142.
- Tao Zhang, Yue-Qiao Hu, Zong-Wen Mo, Pei-Qin Liao, Hiroshi Sakiyama, Tian Han, Xiao-Ming Chen, and Yan-Zhen Zheng, Cobalt(II) Magnetic Metal-Organic Framework with an Effective Kagomé Lattice, Large Surface Area, and High Spin-Canted Ordering Temperature, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2017, 9, 38181-38186.
- Haifu Guo, Jiamei Lei, Liang Qin, Yunqiu Liang, Jingjing Yan, Weijie Lin, Wanqiu Ding, Hiroshi Sakiyama, Jianqiang Liu, Deyun Ma, Metal-Controlled Assembly of Two Coordination Polymers Built from 4,40-Methylenedibenzoic Acid with or Without Methyl-Functionalized N-Donor Ligand, *J. Inorg. Organomet. Polym.*, 2016, 26, 413-422.
- Yu Wu, Bao-Hong Li, Jian-Qiang Liu, Bin Xie, Hiroshi Sakiyama, Stuart R. Batten, An uncommon 3D  $Co_5$ -cluster-based metal-organic framework: Synthesis, structure and magnetism, *Inorg. Chem. Commun.*, 2017, 82, 24-26.
- Xin-Yu Ling, Jun Wang, Chunhua Gong, Lu Lu, Ashish Kumar Singh, Abhinav Kumar, Hiroshi Sakiyama, Qianqian Yang, Jianqiang Liu, Modular construction, magnetism and photocatalytic properties of two new metal-organic frameworks based on a semi-rigid tetracarboxylate ligand, *J. Solid State Chem.*, 2019, 277, 673-679.
- Shile Zhang, Lu Lu, Jing Wang, Xueyan Tan, Baichao An, Ayushi Singh, Abhinav Kumar, Hiroshi Sakiyama, Jun Wang, Photocatalytic and magnetic properties two new Co(II) cluster-based metal-organic frameworks, *Inorg. Chem. Commun.*, 2020, 111, 107563 (5 pages).
- Karl Ridier, Béatrice Gillon, Arsen Gukasov, Grégory Chaboussant, Alain Cousson, Dominique Luneau, Ana Borta, Jean-François Jacquot, Ruben Checa, Yukako Chiba, Hiroshi Sakiyama and Masahiro Mikuriya, Polarized Neutron Diffraction as a tool for mapping the molecular magnetic anisotropy: local susceptibility tensors in  $Co^{2+}$  complexes, *Chem. Eur. J.*, 2016, 22, 724-735.
- Hiroshi Sakiyama, Reiji Sudo, Takaaki Abiko, Daisuke Yoshioka, Ryoji Mitsuhashi, Masataka Omote, Masahiro Mikuriya, Megumi Yoshitake and Masayuki Koikawa, Magneto-structural correlation of hexakis-dmso cobalt(II) complex, *Dalton Trans.*, 2017, 46, 16306-16314.
- Hiroshi Sakiyama, Takaaki Abiko, Kosuke Yoshida, Kaoru Shomura, Ryoji Mitsuhashi, Yoshiki Koyama, Masahiro Mikuriya, Masayuki Koikawa and Minoru Mitsumi, Detailed magnetic analysis and successful deepneural-network-based conformational prediction for  $[VO(dmsO)_5][BPh_4]_2$ , *RSC Adv.*, 2020, 10, 9678-9685.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計66件（うち査読付論文 66件 / うち国際共著 17件 / うちオープンアクセス 42件）

1. 著者名 H. Sakiyama, K. Waki	4. 巻 81
2. 論文標題 Enumeration of Conformers for Octahedral fac/mer-[MX <sub>3</sub> (AB) <sub>3</sub> ] and fac/mer-[MX <sub>3</sub> (ABC) <sub>3</sub> ] Complexes on the Basis of Computational Group Theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 MATCH Commun. Math. Comput. Chem.	6. 最初と最後の頁 593-602
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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Kaoru SHOMURA, Ryoji MITSUHASHI, Masahiro MIKURIYA, Yusuke KATAOKA, Makoto HANDA, Hiroshi SAKIYAMA	4. 巻 35
2. 論文標題 Crystal Structure of a Mononuclear Iron(III) Complex, Crystal Structure of a Mononuclear Iron(III) Complex, Hexakis(dimethylsulfoxide- O)iron(III) Tris(hexafluoridophosphate)	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 X-ray Structure Analysis Online	6. 最初と最後の頁 31-32
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.35.31	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 Hiroshi Sakiyama, Kaoru Shomura, Misaki Ito, Katsushi Waki, Mikio Yamasaki	4. 巻 48
2. 論文標題 Crystal Structure of [Mg(dmsO) <sub>6</sub> ][BPh <sub>4</sub> ] <sub>2</sub> and Formation Mechanism of the Conformer on the Basis of Conformational Analysis	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dalton Trans.	6. 最初と最後の頁 10174-10179
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9DT02173F	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 Xin-Yu Ling, Jun Wang, Chunhua Gong, Lu Lu, Ashish Kumar Singh, Abhinav Kumar, Hiroshi Sakiyama, Qianqian Yang, Jianqiang Liu	4. 巻 277
2. 論文標題 Modular construction, magnetism and photocatalytic properties of two new metal-organic frameworks based on a semi-rigid tetracarboxylate ligand	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Solid State Chem.	6. 最初と最後の頁 673-679
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jssc.2019.07.029	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 Yusuke Kataoka, Nanako Imasaki, Kazuki Arakawa, Natsumi Yano, Hiroshi Sakiyama, Tamotsu Sugimori, Minoru Mitsumi and Makoto Handa	4. 巻 48
2. 論文標題 Paddlewheel-type Diruthenium(III,III) Tetrakis(2-aminopyridinate) Complexes with NIR Absorption Features: Combined Experimental and Theoretical Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dalton Trans.	6. 最初と最後の頁 12421-12429
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9DT02271F	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 H. Sakiyama, K. Waki	4. 巻 82
2. 論文標題 Enumeration of Conformers for Octahedral cis/trans-[MX <sub>4</sub> (AB) <sub>2</sub> ] and cis/trans-[MX <sub>4</sub> (ABC) <sub>2</sub> ] Complexes on the Basis of Computational Group Theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 MATCH Commun. Math. Comput. Chem.	6. 最初と最後の頁 375-383
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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ryusei HOSHIKAWA, Ryoji MITSUHASHI, Masahiro MIKURIYA, Hiroshi SAKIYAMA	4. 巻 35
2. 論文標題 Crystal Structure of a Mononuclear Iron(II) Complex, Tris(1,10-phenanthroline- 2N,N')iron(II) Bis(hexafluoridophosphate)	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 X-ray Structure Analysis Online	6. 最初と最後の頁 67-68
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.35.67	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 Tatsuya Maruyama, Akimi Namekata, Hiroshi Sakiyama, Yuji Kikukawa and Yoshihito Hayashi	4. 巻 43
2. 論文標題 Redox active mixed-valence hexamanganese double-cubane complexes supported by tetravanadates	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 New Journal of Chemistry	6. 最初と最後の頁 17703-17710
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9NJ02437A	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 Hiroshi Sakiyama	4. 巻 18
2. 論文標題 Timesaving for Conformational Analysis by Machine Learning	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem. Jpn.	6. 最初と最後の頁 150-151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2019-0020	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 Shile Zhang, Lu Lu, Jing Wang, Xueyan Tan, Baichao An, Ayushi Singh, Abhinav Kumar, Hiroshi Sakiyama, Jun Wang	4. 巻 111
2. 論文標題 Photocatalytic and magnetic properties two new Co(II) cluster-based metal-organic frameworks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Inorg. Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 107563(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.inoche.2019.107563	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 Ryo Yamaguchi, Hiroshi Sakiyama	4. 巻 175
2. 論文標題 Formation and Decomposition of Nickel(II) Complexes with Tridentate Aminoether or Aminoalcohol Ligands	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 114228(1-8)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2019.114228	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 Hiroshi Sakiyama, Takaaki Abiko, Kosuke Yoshida, Kaoru Shomura, Ryoji Mitsuhashi, Yoshiki Koyama, Masahiro Mikuriya, Masayuki Koikawa and Minoru Mitsumi	4. 巻 10
2. 論文標題 Detailed magnetic analysis and successful deepneural-network-based conformational prediction for [VO(dmsO)5][BPh4]2	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 RSC Adv.	6. 最初と最後の頁 9678-9685
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0ra00854k	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 F. M. Wang, B. H. Li, Z. D. Luo, J. Q. Liu, H. Sakiyama, A. Q. Ma	4. 巻 44
2. 論文標題 Magnetism and Photocatalytic Degradation of Organic Dyes Based on a New Metal Formate Framework	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Russian J. Coord. Chem.	6. 最初と最後の頁 415-420
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1134/S1070328418070011	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 H. Sakiyama, K. Waki	4. 巻 56
2. 論文標題 Enumeration of conformers for octahedral trans/cis-[MX <sub>2</sub> (AB) <sub>4</sub> ] and trans/cis-[MX <sub>2</sub> (ABC) <sub>4</sub> ] complexes on the basis of computational group theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Math. Chem.	6. 最初と最後の頁 3126-3135
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10910-018-0936-z	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 Satoshi KANEKO, Ryoji MITSUHASHI, Masahiro MIKURIYA and Hiroshi SAKIYAMA	4. 巻 34
2. 論文標題 Crystal Structure of a Mononuclear Iron(III) Complex, Dichloridobis(1,10-phenanthroline-2N,N')iron(III) hexafluoridophosphate-acetonitrile	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 X-ray Struct. Anal. Online	6. 最初と最後の頁 49-50
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.34.49	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 J. C. Jin, H. R. Zhong, A. Q. Ma, Y. J. Huang, S. W. Qiu, J. Q. Liu, M. M. Luo, J. W. Xu, Y. Y. Wang, and H. Sakiyama	4. 巻 44
2. 論文標題 Magnetism and Structure of a 3D Uncommon Pentanuclearcopper(II) Coordination Polymer	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Russian J. Coord. Chem.	6. 最初と最後の頁 693-700
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1134/S1070328418110039	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 Hiroshi Sakiyama, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya, Katsushi Waki	4. 巻 17
2. 論文標題 Conformational Analysis for [M(dmsO)6][BPh4]2 [M = Co(II), Zn(II)] Showing Crystal-to-crystal Phase Transition	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem. Jpn.	6. 最初と最後の頁 153-154
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2018-0019	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 Hiroshi SAKIYAMA	4. 巻 4
2. 論文標題 Development of ConfDatMaker Software for Generating the Conformers of Metal Complexes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem. Jpn. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 0013(1-3)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccjie.2018-0013	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 Hiroshi Sakiyama, Takaaki Abiko, Misaki Ito, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya, Katsushi Waki, Takeshi Usuki	4. 巻 158
2. 論文標題 Reversible Crystal-to-Crystal Phase Transition of an Octahedral Zinc(II) Complex with Six Dimethylsulfoxide	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 494-498
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2018.11.030	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 Ryoji Mitsuhashi, Satoshi Hosoya, Takayoshi Suzuki, Yukinari Sunatsuki, Hiroshi Sakiyama and Masahiro Mikuriya	4. 巻 48
2. 論文標題 Hydrogen-bonding interactions and magnetic relaxation dynamics in tetracoordinated cobalt(II) single-ion magnets	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dalton Trans.	6. 最初と最後の頁 395-399
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8DT04537B	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 Masahiro Mikuriya, Satoshi Kurahashi, Seiki Tomohara, Yoshiki Koyama, Daisuke Yoshioka, Ryoji Mitsuhashi and Hiroshi Sakiyama	4. 巻 5
2. 論文標題 Synthesis, Crystal Structures and Magnetic Properties of Mixed-Valent Tetranuclear Complexes with Y-Shaped MnII2MnIII2 Core	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Magnetochemistry	6. 最初と最後の頁 8(1-13)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/magnetochemistry5010008	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 H. Sakiyama, K. Waki	4. 巻 81
2. 論文標題 Enumeration of Edge-Oriented Conformers of Octahedral [M(ABC)6] Complex on the Basis of Computational Group Theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 MATCH Commun. Math. Comput. Chem.	6. 最初と最後の頁 91-104
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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hiroshi Sakiyama	4. 巻 5
2. 論文標題 Theoretical equations of Zeeman energy levels for distorted metal complexes with 3T1 ground terms	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Magnetochemistry	6. 最初と最後の頁 17(1-10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/magnetochemistry5010017	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 Hiroshi Sakiyama	4. 巻 57
2. 論文標題 Theoretical equations of Zeeman energy levels for distorted metal complexes with 5T2g ground terms	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Math. Chem.	6. 最初と最後の頁 858-874
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10910-018-0987-1	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 Makoto Handa, Haruki Yairi, Natsumi Yano, Minoru Mitsumi, Hiroshi Sakiyama, Masaharu Kitashima, Kazuhito Inoue, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya, Haruo Akashi, and Yusuke Kataoka	4. 巻 5
2. 論文標題 Magnetic and Electrochemical Properties of Lantern-Type Dinuclear Ru(II,III) Complexes with Axial Chloride Ions or Water Molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Magnetochemistry	6. 最初と最後の頁 18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/magnetochemistry5010018	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 Mayu Tsukamoto, Kazuki Ebata, Hiroshi Sakiyama, Shunsuke Yamamoto, Masaya Mitsuishi, Tokuji Miyashita, and Jun Matsui	4. 巻 35
2. 論文標題 Biomimetic polyelectrolytes based on polymer nanosheet films and their proton-conduction mechanism	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 3302-3307
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.8b04079	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 Kuan Lu, De-Yun Ma, Hiroshi Sakiyama	4. 巻 91
2. 論文標題 Two metal-organic frameworks constructed from 2,5-thiophenedicarboxylate and methyl-functionalized N-donor ligands with magnetic, luminescent and catalytic studies	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorg. Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 39-43
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.inoche.2018.03.004	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 Kosuke YOSHIDA, Ryoji MITSUHASHI, Masahiro MIKURIYA, and Hiroshi SAKIYAMA	4. 巻 34
2. 論文標題 Crystal Structure of a Mononuclear Iron(III) Complex, Chloridopentakis(dimethylsulfoxide-O)iron(III) bis(tetraphenylborate)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 X-ray Struct. Anal. Online	6. 最初と最後の頁 1-2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.34.1	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 Hiroshi SAKIYAMA, Saki TAKAHATA, Naoki KASHIMOTO, Ryoji MITSUHASHI, and Masahiro MIKURIYA	4. 巻 33
2. 論文標題 Crystal Structure of a Dinuclear Magnesium(II) Complex with 4-Chloro-2,6-bis[(2-hydroxyethyl)methylaminomethyl]phenolate	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 X-ray Struct. Anal. Online	6. 最初と最後の頁 75-76
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.33.75	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 Hiroshi Sakiyama, Reiji Sudo, Takaaki Abiko, Daisuke Yoshioka, Ryoji Mitsuhashi, Masataka Omote, Masahiro Mikuriya, Megumi Yoshitake and Masayuki Koikawa	4. 巻 46
2. 論文標題 Magneto-structural correlation of hexakis-dmsco cobalt(II) complex	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Dalton Trans.	6. 最初と最後の頁 16306-16314
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7DT03269B	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 Tao Zhang, Yue-Qiao Hu, Zong-Wen Mo, Pei-Qin Liao, Hiroshi Sakiyama, Tian Han, Xiao-Ming Chen, and Yan-Zhen Zheng	4. 巻 9
2. 論文標題 Cobalt(II) Magnetic Metal-Organic Framework with an Effective Kagome Lattice, Large Surface Area, and High Spin-Canted Ordering Temperature	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ACS Appl. Mater. Interfaces	6. 最初と最後の頁 38181-38186
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.7b10757	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 Jun Wang, Bao-Hong Li, Lu Lu, Jian-Qiang Liu, Hiroshi Sakiyama and Abhinav Kumar	4. 巻 46
2. 論文標題 An unusual zig-zag 1D copper(II) coordination polymer displaying magnetic phase transition	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Dalton Trans.	6. 最初と最後の頁 15178-15180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7DT03539J	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 Megumi Yoshitake, Momoko Nishihashi, Yasumasa Ogata, Ko Yoneda, Yasunori Yamada, Hiroshi Sakiyama, Akio Mishima, Masaaki Ohba, Masayuki Koikawa	4. 巻 136
2. 論文標題 Syntheses, Structures, and Magnetic Properties of Cubane-Based Cobalt and Nickel Complexes with ONO-Tridentate Ligands	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 136-142
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2017.03.043	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 Yusuke Kataoka, Saki Mikami, Hiroshi Sakiyama, Minoru Mitsumi, Tatsuya Kawamoto, Makoto Handa	4. 巻 136
2. 論文標題 A neutral paddlewheel-type diruthenium(III) complex with benzamidinato ligands: Synthesis, crystal structure, magnetism, and electrochemical and absorption properties	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 87-92
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2017.03.005	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 Deyun Ma, Jun Wang, Liang Qin, Haifu Guo, Shujun Li, Manfei Huang, Huimin Liu, Rui Xie, Hiroshi Sakiyama, Jun Xu	4. 巻 27
2. 論文標題 A New 2D Europium(III) Coordination Polymer Based on 4-Bromoisophthalate Ligand: Synthesis, X-ray Structure, Luminescent and Magnetic Properties	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Inorg. Organomet. Polymers and Materials	6. 最初と最後の頁 1514-1520
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10904-017-0611-z	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 Tatsuya Maruyama, Yuji Kikukawa, Hiroshi Sakiyama, Misaki Katayama, Yasuhiro Inada and Yoshihito Hayashi	4. 巻 7
2. 論文標題 A highly-flexible cyclic-decavanadate ligand for interconversion of dinuclear- and trinuclearcobalt(II) and manganese(II) cores	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 RSC Adv.	6. 最初と最後の頁 37666-37674
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7RA05941H	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 Yu Wu, Bao-Hong Li, Jian-Qiang Liu, Bin Xie, Hiroshi Sakiyama, Stuart R. Batten	4. 巻 82
2. 論文標題 An uncommon 3D Co5-cluster-based metal-organic framework: Synthesis, structure and magnetism	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorg. Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 24-26
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.inoche.2017.05.003	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 Hiroshi Sakiyama, Katsushi Waki	4. 巻 55
2. 論文標題 Enumeration of Conformers for Octahedral [MX(AB)5] and [MX(ABC)5] Complexes on the Basis of Computational Group Theory	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Math. Chem.	6. 最初と最後の頁 1360-1366
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10910-017-0751-y	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 Hiroshi SAKIYAMA, Misaki ICHI, Ryoji MITSUHASHI, and Masahiro MIKURIYA	4. 巻 33
2. 論文標題 Crystal Structure of a Tetracoordinate Organoboron Coordination Compound, Dimethylformamide-triphenylborane Complex	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 X-ray Struct. Anal. Online	6. 最初と最後の頁 29-30
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.33.29	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 Jongwan LIM, Yunseok SHIN, Sanghoon RYU, Ryoji MITSUHASHI, Masataka OMOTE, Hiroshi SAKIYAMA, and Masahiro MIKURIYA	4. 巻 33
2. 論文標題 Ferromagnetic Dinuclear Nickel(II) Complex with a Schiff-base Having a Di- $\mu$ -phenolato- $\mu$ -methanol-bridged Core	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 X-ray Struct. Anal. Online	6. 最初と最後の頁 21-23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.33.21	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 Misaki Ito, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya, and Hiroshi Sakiyama	4. 巻 32
2. 論文標題 Crystal Structure of a Dinuclear Zinc(II) Complex with a Phenol-based Dinucleating Ligand	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 X-ray Structure Analysis Online	6. 最初と最後の頁 13-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.32.13	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 Misaki Ito, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya, and Hiroshi Sakiyama	4. 巻 32
2. 論文標題 Crystal Structure of Trigonally Compressed Hexakis-DMF Zinc(II) Complex	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 X-ray Structure Analysis Online	6. 最初と最後の頁 21-22
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.32.21	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 Hiroshi Sakiyama and Katsushi Waki	4. 巻 7
2. 論文標題 Enumeration of Conformers of Octahedral [M(ABC) <sub>6</sub> ] Complex on the Basis of Computational Group Theory	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Iranian Journal of Mathematical Chemistry	6. 最初と最後の頁 223-234
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.22052/ijmc.2016.13926	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 Misaki Ito, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya, and Hiroshi Sakiyama	4. 巻 32
2. 論文標題 Crystal Structure of a C <sub>2</sub> -symmetric Hexakis-DMF Magnesium(II) Complex	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 X-ray Structure Analysis Online	6. 最初と最後の頁 27-28
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.32.27	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 Archana Velloth, Yutaka Imamura, Hiroshi Sakiyama, Masahiko Hada	4. 巻 89
2. 論文標題 Correlating magnetic exchange in dinuclear bis(phenolate)-bridged complexes: A computational perspective	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 657-665
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20160077	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 Fenglan Liang, Kuan Lu, Jingjing Yan, Weijie Lin, Wanqiu Ding, Husheng Lu, Dongting Lin, Hiroshi Sakiyama, Deyun Ma, Liang Qin	4. 巻 41
2. 論文標題 Hydrostable coordination polymers of a methyl-functionalized 4,40-bipyridine ligand: structure, stability, magnetic and luminescent properties	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Transition Metal Chemistry	6. 最初と最後の頁 489-498
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11243-016-0044-5	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 Deyun Ma, Peng Hu, Liang Qin, Jingjing Yan, Weijie Lin, Wanqiu Ding, Husheng Lu, Dongting Lin, Hiroshi Sakiyama, Fenglan Liang	4. 巻 26
2. 論文標題 Synthesis, Characterization, and Magnetic Properties of Two Transition Metal Coordination Polymers Based on 2,5-Furandicarboxylic Acid and N-Donor Ligands	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials	6. 最初と最後の頁 1053-1060
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10904-016-0429-0	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 Hiroshi Sakiyama	4. 巻 2
2. 論文標題 Development of MagSaki(Tetra) Software for the Magnetic Analysis of Tetranuclear High-spin Cobalt(II) Complexes	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan-International Edition	6. 最初と最後の頁 1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccjie.2016-0001	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 Hiroshi Sakiyama, Misaki Ito, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya	4. 巻 15
2. 論文標題 The Effect of the Anions in the Crystal on the Structure of [Mg(DMF)6]2+	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 49-50
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2016-0035	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 Hiroshi Sakiyama, Takaaki Abiko, Misaki Ito, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya, Katsushi Waki	4. 巻 119
2. 論文標題 Conformational Analysis of an Octahedral Zinc(II) Complex with Six Dimethylsulfoxide	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 512-516
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2016.09.039	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 Hiroshi Sakiyama, Yukako Chiba, Katsuya Tone, Mikio Yamasaki, Masahiro Mikuriya, J. Krzystek, Andrew Ozarowski	4. 巻 56
2. 論文標題 Magnetic Properties of a Dinuclear Nickel(II) Complex with 2,6-Bis[(2-hydroxyethyl)methylaminomethyl]-4-methylphenolate	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 138-146
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.6b01671	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 Hiroshi Sakiyama, Takaaki Abiko, Misaki Ito, Katsushi Waki, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya	4. 巻 15
2. 論文標題 Conformational Analysis of [M(ABC)6] Complex	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 213-214
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2016-0067	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 Hiroshi Sakiyama, Yuichiro Ishiyama, Hiroki Sugawara	4. 巻 50
2. 論文標題 Trigonally-Compressed Octahedral Geometry of hexaamminecobalt(III) Complex Cation in Aqueous Solution Investigated from the Electronic Spectra	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Spectroscopy Letters	6. 最初と最後の頁 111-114
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00387010.2017.1295272	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 Ryo Yamaguchi, Takashi Tokue, Yoshio Watanabe, Katsuya Tone, Yusuke Tamashiro, Eiji Asato, Hiroshi Sakiyama	4. 巻 96
2. 論文標題 Structural investigation of nickel(II) complexes with bidentate aminoether ligands in solution based on the electronic spectra	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 44-50
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2015.04.025	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 Keita Abe, Hiroshi Sakiyama, Yuzo Nishida	4. 巻 14
2. 論文標題 Structural Investigation of Four Dinuclear Iron(III) Complexes Relevant to Renal Injuries	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 J. Comp. Chem. Jpn.	6. 最初と最後の頁 23-29
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccjie.2015-0002	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 Yuya Hiraoka, Takahisa Ikeue, Hiroshi Sakiyama, Frederic Guegan, Dominique Luneau, Beatrice Gillon, Ichiro Hiromitsu, Daisuke Yoshioka, Masahiro Mikuriya, Yusuke Kataoka and Makoto Handa	4. 巻 44
2. 論文標題 An Unprecedented Up-Field Shift in <sup>13</sup> C NMR Spectrum for Carboxyl Carbon of Lantern-Type Dinuclear Complex TBA [Ru <sub>2</sub> (O <sub>2</sub> CCH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub> ] (TBA <sup>+</sup> = Tetra(n-butyl)ammonium Cation)	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Dalton Trans.	6. 最初と最後の頁 13439-13443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c5dt01680k	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 Hiroshi Sakiyama, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya	4. 巻 31
2. 論文標題 Pseudo-S6 Complex Cations of a Hexakis-N-methylformamide Nickel(II) Complex	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 X-ray Structure Analysis Online	6. 最初と最後の頁 45-46
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2116/xraystruct.31.45	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 Hiroshi Sakiyama	4. 巻 14
2. 論文標題 Stereoselectivity in Peptide Hydrolysis by Chiral Dizinc Complexes	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 J. Comp. Chem. Jpn.	6. 最初と最後の頁 67-68
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2015-0028	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 Hiroshi Sakiyama, Katsushi Waki	4. 巻 1
2. 論文標題 Conformational Analysis of Hexakis-N-Methylformamide Nickel(II) Complex on the Basis of Computational Group Theory and Density Functional Theory	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem. Jpn. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 5-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccjie.2015-0047	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 Hiroshi Sakiyama	4. 巻 1
2. 論文標題 Development of MagSaki(Tri) Software for the Magnetic Analysis of Trinuclear High-spin Cobalt(II) Complexes	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem. Jpn. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 9-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccjie.2015-0050	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 Shuichi Otomo, Hiroshi Sakiyama	4. 巻 14
2. 論文標題 Molecular Structure Prediction of Iron(III) Complexes with a Biodegradative Chelating Agent	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 J. Comp. Chem. Jpn.	6. 最初と最後の頁 184-185
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 184-185	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 Masahiro Mikuriya, Mayu Hamagawa, Daisuke Yoshioka, PhD, Shoichi Hori, Taro Kuriyama, Hiroshi Sakiyama, Makoto Handa	4. 巻 70
2. 論文標題 Nickel(II) complex with 1,4,7-tris(2-aminoethyl)-1,4,7-triazacyclononane	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Chemical Papers	6. 最初と最後の頁 69-74
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1515/chempap-2015-0165	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 Karl Ridier, Beatrice Gillon, Arsen Gukasov, Gregory Chaboussant, Alain Cousson, Dominique Luneau, Ana Borta, Jean-Francois Jacquot, Ruben Checa, Yukako Chiba, Hiroshi Sakiyama, Masahiro Mikuriya	4. 巻 22
2. 論文標題 Polarized Neutron Diffraction as a tool for mapping the molecular magnetic anisotropy: local susceptibility tensors in Co <sup>2+</sup> complexes	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Chem. Eur. J.	6. 最初と最後の頁 724-735
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201503400	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 Haifu Guo, Jiamei Lei, Liang Qin, Yunqiu Liang, Jingjing Yan, Weijie Lin, Wanqiu Ding, Hiroshi Sakiyama, Jianqiang Liu, Deyun Ma	4. 巻 26
2. 論文標題 Metal-Controlled Assembly of Two Coordination Polymers Built from 4,40-Methylenedibenzoic Acid with or Without Methyl-Functionalized N-Donor Ligand	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Inorg. Organomet. Polym.	6. 最初と最後の頁 413-422
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10904-015-0323-1	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 Jian Wu, Wei-Cong Liu, Xi-Ren Wu, Jian-Qiang Liu, Hiroshi Sakiyama, Reena Yadav, Abhinav Kumar	4. 巻 1114
2. 論文標題 An intramolecular antiferromagnetically coupled pentanuclear Mn(II) cluster containing acetate and tetracarboxylate linkers: Synthesis, structure and magnetism	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Mol. Struct.	6. 最初と最後の頁 7-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molstruc.2016.02.049	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 Hiroshi Sakiyama, Masatoshi Kato, Satoshi Sasaki, Moriya Tasaki, Eiji Asato, Masayuki Koikawa	4. 巻 111
2. 論文標題 Synthesis and Magnetic Properties of a Dinuclear Manganese(II) Complex with Two Manganese(II) Ions of C <sub>2</sub> -Twisted Octahedral Geometry	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 32-37
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2016.03.005	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37件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 塚本 真由・松井淳・崎山博史・山本俊介・宮下徳治・三ツ石方也
2. 発表標題 生体膜類似構造を有する高分子ナノシート電解質の2次元プロトン伝導
3. 学会等名 第68回高分子学会年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 崎山博史
2. 発表標題 マシンラーニングによる配座解析の時間短縮
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019年春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shohei Yamamoto, Hiroshi Sakiyama
2. 発表標題 Synthesis and properties of $[VO(dmf)_5][PF_6]_2$ complex
3. 学会等名 2019年度化学系学協会東北大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ryusei Hoshikawa, Kosuke Yoshida, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya, Hiroshi Sakiyama
2. 発表標題 Preparation of mononuclear and dinuclear iron(III) complexes with phenanthroline
3. 学会等名 2019年度化学系学協会東北大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroshi Sakiyama, Keisei Takahashi, Yusuke Kataoka, Makoto Handa, Mikio Yamasaki
2. 発表標題 Structure and magnetic properties of 1D octahedral high-spin cobalt(II) 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 Ryoji Mitsuhashi, Satoshi Hosoya, Takayoshi Suzuki, Yukinari Sunatsuki, Hiroshi Sakiyama, Masahiro Mikuriya
2. 発表標題 Slow Magnetic Relaxation in Tetracoordinated Cobalt(II) Complexes with One-Dimensional Hydrogen-Bonded Networks
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 今崎那奈子, 片岡 祐介, 矢野 なつみ, 崎山 博史, 杉森 保, 満身 稔, 半田 真
2. 発表標題 アミノピリジン架橋パドルホイール型ルテニウム(III)二核錯体の合成
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 今崎那奈子・矢野なつみ・崎山博史・満身稔・半田真・片岡祐介
2. 発表標題 近赤外吸収特性を有するアミノピリジン架橋ルテニウム( )二核錯体の置換基効果
3. 学会等名 2019年日本化学会中国四国支部大会 徳島大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 崎山博史
2. 発表標題 [Co(dmsO)6](BPh4)2錯体の結晶相転移と配座解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018年春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 奥野 愛里, 片岡 祐介, 崎山博史, 満身 稔, 川本 達也, 半田 真
2. 発表標題 ベンズアミジナート架橋を有するパドルホイール型ルテニウム二核錯体の電子状態と磁氣的性質
3. 学会等名 錯体化学会 第68回討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Sakiyama · Kosuke Yoshida · Ryoji Mitsuhashi · Masahiro Mikuriya
2. 発表標題 Structure and magnetic properties of an oxo-bridged iron(III) complex
3. 学会等名 錯体化学会 第68回討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Sakiyama, T. Abiko, K. Yoshida, R. Mitsuhashi, M. Mikuriya, M. Koikawa
2. 発表標題 Structure and magnetic properties of an oxidovanadium(IV) complex with five dimethylsulfoxide ligands
3. 学会等名 43rd International Conference on Coordination Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 正村薫、脇克志、崎山博史
2. 発表標題 [Fe(dmsO)6]3+錯カチオンの配座解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018年秋季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 崎山博史
2. 発表標題 正八面体型錯体用配座異性体創出プログラムConfDatMakerの開発
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018年秋季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋慧星、西村拓士、崎山博史
2. 発表標題 BPh4-イオンが作る三次元構造のシミュレーション
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018年秋季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 兼子哲、崎山博史
2. 発表標題 [FeCl <sub>2</sub> (phen) <sub>2</sub> ]+錯カチオンの構造予測
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018年秋季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Handa, A. Okuno, H. Sakiyama, M. Mitsumi, T. Kawamoto, Y. Kataoka
2. 発表標題 Structures and Properties of Paddlewheel-type Diruthenium(II,III) Complexes with Benzamidinate Ligands
3. 学会等名 25 International SPACC Symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 崎山博史、脇克志
2. 発表標題 MX(AB) <sub>5</sub> 錯体の異性体数え上げと配座解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2017年春季年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroshi Sakiyama, Takaaki Abiko, Masayuki Koikawa, Mikio Yamasaki
2. 発表標題 Magneto-structural Correlation of an Octahedral High-spin Iron(II) Complex
3. 学会等名 錯体化学会 第67回討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 奥野愛里, 片岡祐介, 矢野なつみ, 崎山博史, 満身稔, 半田真
2. 発表標題 テトラキス(ベンズアミジナート)ルテニウム二核錯体の合成
3. 学会等名 錯体化学会 第67回討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroshi Sakiyama
2. 発表標題 Magneto-structural correlation of high-spin cobalt(II) complexes
3. 学会等名 3rd International Conference on Functional Molecular Materials (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 崎山博史、伊藤美咲、三橋了爾、御厨正博
2. 発表標題 [Mg(DMF)6]2+の構造に及ぼすクリスタルパッキングの効果
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2016年春季年会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hiroshi Sakiyama, Keiai Itagaki, Kyohei Sugawara, Daisuke Yoshioka, Masahiro Mikuriya
2. 発表標題 Magnetic analysis of multinuclear octahedral high-spin cobalt(II) complexes
3. 学会等名 42nd International Conference on Coordination Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Megumi Yoshitake, Yasumasa Ogata, Momoko Nishihashi, Ko Yoneda, Yasunori Yamada, Hiroshi Sakiyama, Masayuki Koikawa
2. 発表標題 Syntheses, Structures, and Magnetic Properties of Tetranuclear Cobalt and Nickel Complexes with ONO-Tridentate Ligands
3. 学会等名 The 15th International Conference on Molecule-Based Magnets (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hiroshi Sakiyama, Reiji Sudo, Daisuke Yoshioka, Ryoji Mitsuhashi, Masahiro Mikuriya
2. 発表標題 Magneto-Structural Relationship of High-Spin Cobalt(II) Complexes
3. 学会等名 The 15th International Conference on Molecule-Based Magnets (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Archana Velloth, Yutaka Imamura, Hiroshi Sakiyama, Masahiko Hada
2. 発表標題 Theoretical Study on Co Mononuclear and Dinuclear Complexes toward Exploring Single Molecular Magnets
3. 学会等名 The 15th International Conference on Molecule-Based Magnets (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hiroshi SAKIYAMA, Reiji SUDO, Daisuke YOSHIOKA, Ryoji MITSUHASHI, Masahiro MIKURIYA
2. 発表標題 Magneto-structural Relationship of C2-Deformed Octahedral High-spin Cobalt(II) Complexes
3. 学会等名 錯体化学会第66回討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 崎山博史, 田崎盛也, 安里英治
2. 発表標題 四核亜鉛錯体の4プロトン4電子移動に伴う可視スペクトル変化シミュレーション
3. 学会等名 錯体化学会第66回討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 崎山博史, 安孫誉晃, 伊藤美咲, 脇克志, 三橋了爾, 御厨正博
2. 発表標題 [Zn(DMSO)6]2+錯体の配座解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2016秋季年会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 崎山博史
2. 発表標題 キラルな二核亜鉛錯体によるペプチド加水分解反応の立体選択性
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2015春季年会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Keita Abe, Hiroshi Sakiyama, Yuzo Nishida
2. 発表標題 Structural Investigation of Dinuclear Iron(III) Complexes Relevant to Renal Injuries and Carcinogenesis
3. 学会等名 EuChemS - 2015 - Inorganic Chemistry Conference (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 崎山博史, 菅原恭平, 板垣慶愛, 吉岡大輔, 中優子, 御厨正博
2. 発表標題 フェノキソ架橋二核コバルト(II)錯体の合成と性質
3. 学会等名 錯体化学会 第65回討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 石山晋太郎, 金田力, 山崎幹緒, 千葉友香子, 柴山純, 崎山博史
2. 発表標題 二核マグネシウム錯体の合成とフォスファターゼ活性
3. 学会等名 錯体化学会 第65回討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 阿部啓太, 西田雄三, 崎山博史
2. 発表標題 新規除鉄剤と認知症対策
3. 学会等名 錯体化学会 第65回討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 大友秀一, 崎山博史
2. 発表標題 生分解性キレート剤が作る金属錯体の構造予測
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2015秋季年会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Masahiro Mikuriya, Miho Kiyohara, Yuki Katayama, Shinbi Inoue, Aki Sakaguchi, Daisuke Yoshioka, Naomi Kawata, Tsutomu Mizuta, Akira Fuyuhiko, Hiroshi Sakiyama, Ryoji Mitsuhashi
2. 発表標題 Some cobalt complexes with N,N'-bis(2-hydroxy-3,5-dimethylbenzyl)-N,N'-dimethyl-1,2-ethanediamine
3. 学会等名 2015年日本化学会中国四国支部大会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Archana Velloth, Hiroshi Sakiyama, Masahiko Hada
2. 発表標題 Correlating magnetic exchange in dinuclear bis-(phenolate) bridged complexes: A computational perspective
3. 学会等名 The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015 (国際学会)
4. 発表年 2015年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

崎山研究室 <a href="http://hp.vector.co.jp/authors/VA013549/saki/indexj.html">http://hp.vector.co.jp/authors/VA013549/saki/indexj.html</a> Homepage of MagSaki <a href="http://hp.vector.co.jp/authors/VA013549/saki/mstop.html">http://hp.vector.co.jp/authors/VA013549/saki/mstop.html</a> Hiroshi Sakiyama ResearchGate <a href="https://www.researchgate.net/profile/Hiroshi_Sakiyama">https://www.researchgate.net/profile/Hiroshi_Sakiyama</a>
--

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