

令和 6 年 6 月 14 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04995

研究課題名(和文) 開殻分子からなる新奇光機能マクロ物質の量子設計

研究課題名(英文) Quantum design for novel optical functional materials composed of open-shell molecules

研究代表者

岸 亮平 (Kishi, Ryohei)

大阪大学・大学院基礎工学研究科・准教授

研究者番号：90452408

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、開殻分子からなる新奇光機能マクロ物質の量子設計指針の構築を目的とし、これを扱う理論・計算・解析手法の開発を行った。分子集合系の電子状態を、構成要素に関する物理パラメータをもとに表現するモデルハミルトニアンに基づく計算・解析法を駆使し、集合系レベルの電子状態と光学応答物性を制御する分子内構造/分子間相互作用の支配因子を明らかにし、開殻分子の積層集合系における設計指針を検討した。積層集合系の電荷分布を制御には各分子の軌道広がり効果の、HOMO-LUMOギャップの制御には部分系のジラジカル因子の推算が重要であり、これらは新奇光機能マクロ物質の設計に重要であることが明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果は、有機分子の集合系に基づく光応答や電子物性の制御や、これらを可能とする新奇分子材料の設計指針の構築において重要な基礎的知見を与えると期待される。また、構築した計算・解析手法は汎用性があり、有機分子やその集合系以外の電子状態や機能性の検討に適用可能である。これらを総合することで、軽量で加工が容易で原料が安価な分子材料に基づく高度な情報処理デバイス材料の基盤材料設計に寄与すると期待される。

研究成果の概要(英文)：The aim of this study is to establish quantum design guidelines for novel optical macromaterials composed of open-shell molecules, and to develop theoretical, computational and analytical methods to deal with them. The electronic states of molecular assemblies are expressed in terms of physical parameters related to the constituent molecular species, and the dominant factors of intramolecular structural/intermolecular interactions that control the electronic states and optical response properties at the assembly level are clarified by utilizing the model Hamiltonian approach. Then, the design guidelines for  $\pi$ -stacking assembly systems of open-shell molecules are investigated. It is found that the orbital expansion effect of each molecule is important for controlling the charge distribution in the  $\pi$ -stacking assembly system, and the diradical character of the subsystem is important for controlling the HOMO-LUMO gap, which are useful for the design of novel functional macromaterials.

研究分野：理論化学

キーワード：開殻分子 分子集合系 電子状態 光応答物性 モデルハミルトニアン

### 1. 研究開始当初の背景

高速かつ大量な情報処理を可能とするソフトウェア技術の進歩とともに、これをハード面から支え、必要な時に必要な場所で駆動する、高度な情報処理デバイス材料の開発が必要とされている。原料が豊富で高い加工性を持ち、優れた外場応答物性を示す分子材料の開発に対する需要と期待は、近年特に高まっている。一般に分子材料の設計では、まずはコアとなる単分子骨格レベルでの構造・物性制御に力点が置かれる。一方でデバイス材料の用途では、マクロ物質としての物性や機能発現が重要であるため、分子配向や分子間相互作用の制御を経て、マクロレベルの材料設計・評価が行われる。このような段階を踏む材料設計の戦略では、第2、第3段階の設計から分子レベルの設計へのフィードバックが十分でない場合、優れた分子物性をマクロレベルの機能に十分活かしかねないことも多い。今後ますます高まるであろう、エネルギーや情報の伝達・変換に適した外場応答分子材料への需要と期待に答えるためには、ミクロからマクロまでの構造-外場応答物性の相関を統一的に扱う設計原理の構築が求められる。

研究代表者はこれまで、分子レベルの構造-物性相関解明の観点から、開殻分子の外場応答機能の機構解明と分子設計の理論研究を行ってきた。開殻分子とは、不対電子を伴う電子構造を持つ分子の総称である。このような開殻性の電子構造は、物理的・化学的刺激に鋭敏に応答するため、これを分子レベルで巧みに制御することで、従来閉殻系を遥かに凌駕する優れた分子レベルの光応答物性を示すことが明らかになってきた。さらに、分子構造を反映した不対電子の空間分布に起因する、光応答物性の顕著な異方性も予測されている。これらの観点から開殻分子が光応答機能分子として注目され始めた結果、分子レベルの設計に関する実験・理論が進展し、その候補分子も多数提案されてきた。最近では、開殻分子からなるマクロ物質の創成にも焦点が当てられつつある。新奇な光応答機能を示す、デバイス応用可能な分子材料の新領域創成には、A) 開殻分子が示す巨大光応答物性とその顕著な異方性をマクロレベルで活かす材料設計、B) 開殻分子が集団系を成すことで発現する光応答機能の開拓、C) これらを可能にする理論の構築、について探求することが必要と考えられる。

### 2. 研究の目的

前述の背景を踏まえ、本研究では、開殻分子からなる新奇光機能マクロ物質の量子設計指針の構築を目的とした研究課題に取り組んだ。研究代表者は近年、開殻性の電子構造を記述する上で最も重要な、分子内のフロンティア電子間相互作用を、有効2サイトモデルにおける移動積分  $t$ 、有効クーロン反発  $U$ 、交換積分  $K$  といった原子価結合 (VB) 描像の物理パラメータに焼き直し、実在の分子系においてこれらの量を量子化学計算に基づき算出することで、化学修飾による分子の光・磁気応答物性変化の機構を解明する計算・解析法を独自に開発してきた。

本研究では、有効サイトモデルに基づく計算・解析法を、開殻分子からなる分子集合体や分子性結晶へと適用できるように拡張する(前項の項目Cに対応)。特に、系全体の分子軌道計算から得られるMO描像と、有効サイトモデルに基づくVB描像とを行き来できる手法の開発を目指した。これにより、分子レベル-分子間相互作用-マクロレベルを、同じ理論のもとで統一して扱うことができ、フィードバックループによる物質設計を機能させることができる。本手法を駆使し、前項のA、Bで挙げた項目の探求に取り組むことで、各段階で共通する電子構造-光応答物性相関の支配因子を見出し、マクロ物質における最適設計へと繋ぐ。これにより、開殻分子に基づく新奇光機能分子材料の新しい学術領域を開拓することが、長期的視点での到達目標である。

### 3. 研究の方法

開殻分子からなる新奇光機能マクロ物質の量子設計という目的を達成するためには、まず開殻分子の集団系を扱う理論・計算手法を確立させる必要がある。研究開始当初は、単一分子レベルで開発した、領域分割パラメータを最適化した長距離補正密度汎関数(tuned-LC-DFT)法による軌道を変換して得られる局在化自然軌道基底により、有効サイトモデルを構築し、対応する物理パラメータを算出する方法を検討した。この手法により算出された物理パラメータを用いて、分子レベルの  $S_0-S_1$  や  $S_0-T_1$  ギャップの実験値の傾向を定性的に記述することが可能となっている。しかし、相互作用する分子集団系では、分子内と分子間とで相互作用を記述する物理パラメータが異なるため、直接このスキームを相互作用する開殻分子の集団系の場合に拡張することは難しいことがわかった。そこで、より高精度な多参照摂動論計算の結果を軌道局在化と透熱化の方法を駆使して変換し、対応するモデルハミルトニアン行列を構築する方法を開発した。

一方で、ハバードモデルのような固体系で成功しているモデルハミルトニアンをもとに、これを拡張する方向性の開発も検討した。具体的には、通常ハバードモデルでは含まれていない、各サイト軌道の大きさや形状を考慮したパラメータを考慮し、これを定義した拡張されたモデルハミルトニアンに対する解をもとに、様々な分子内/分子間の幾何・電子構造に対応する電荷分布や光学応答物性を解析し、各種物性量の構造因子、物理パラメータに対する依存性を検討した。これによりマクロ物質特有の機能が発現するパラメータ領域を明らかにした。

#### 4. 研究成果

##### (a) $\pi$ 共役分子の積層系における構成分子の個性を考慮したモデルハミルトニアン of 拡張

2021 年に Brown らはドナー (D) 種としてテトラメチルテトラチアフルバレン (TMTTF)、アクセプタ (A) 種としてドデカメチルカルボラン (Me<sub>12</sub>-Car) とヘキサプロモボラン (Br<sub>6</sub>-Car) を用いた 2 種類の CT 錯体の合成と物性の検討を行った。これらの CT 錯体の D と A の比(D:A)は、それぞれ 3:1 (A = Me<sub>12</sub>-Car) と 3:2 (A = Br<sub>6</sub>-Car) であり、ともに TMTTF が対面積層した孤立 3 量体を形成していることが確認された。すなわちこれらの孤立 3 量体は、モノカチオン状態 (TMTTF<sub>3</sub><sup>+</sup>)、ジカチオン状態 (TMTTF<sub>3</sub><sup>2+</sup>) に相当するため、 $\pi$  積層 3 量体の全体に +1e、+2e の正電荷が非局在化した電荷分布を有する。X 線結晶構造解析による結合交代パターンから、各分子上の正電荷の分布を推算することが可能であり、その解析結果から、TMTTF<sub>3</sub><sup>+</sup> (D:A=3:1) では中央の単量体が両端の単量体よりも 3 倍程度大きな正電荷を有し、TMTTF<sub>3</sub><sup>2+</sup> (D:A=3:2) では両端の単量体が中央の単量体よりも 6 倍程度大きな正電荷を有することが明らかにされた。しかしながら、このような  $\pi$  共役分子 3 量体の電子酸化状態に依存した電荷分布が得られる機構は十分に明らかになっていない。そこで、以前の研究で拡張した VBCI モデルハミルトニアンを用いて、この電荷分布の機構を明らかにするとともに、一般の  $\pi$  共役分子  $N$  量体のモノカチオン状態およびジカチオン状態の電荷分布の予測を行なった。

本研究で定義したモデルハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$\hat{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + U \sum_i a_{i1}^\dagger a_{i1} a_{i2}^\dagger a_{i2} + \sum_{i < j} \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow} U_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{j\sigma'}^\dagger a_{j\sigma'} - \sum_i \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} h_i a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + \sum_{i < j} \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow} \chi_{ij} U_{12} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{j\sigma'}^\dagger a_{j\sigma'} \quad (1)$$

ここで、 $t$  は隣接サイト間移動積分、 $U$  と  $U_{ij}$  はオンサイトおよびサイト間クーロン反発、 $h_i$  は電子-原子核間の有効的なクーロンポテンシャルをそれぞれ表す。最終項が、以前の研究で  $\pi$  ラジカル分子の  $\pi$  積層集合系のカチオン状態の光応答物性を検討する際に新たに導入した軌道広がり項である。このモデルハミルトニアンにおいて軌道広がり効果を無視すると、拡張ハバードモデルのハミルトニアンに帰着される。この軌道広がり効果は、 $\pi$  積層集合系の各構成分子の  $\pi$  軌道が積層方向に広がりを持つことにより生じる、エネルギーへの影響を記述する項である。隣接サイト間に働く電子-コア間の引力と電子-電子間の斥力のバランスは、この軌道広がりを考慮する場合には、一般に釣り合わなくなる。この効果は全体の電荷が中性ではなくイオン状態になる場合に顕著に現れるため、前述の CT 錯体の電荷分布を特徴づける構造因子であると考えた。 $\pi$  共役分子 3 量体のモノカチオン状態およびジカチオン状態の VB 配置の配置間相互作用の定性的な解析結果を図 1a、1b に示す。

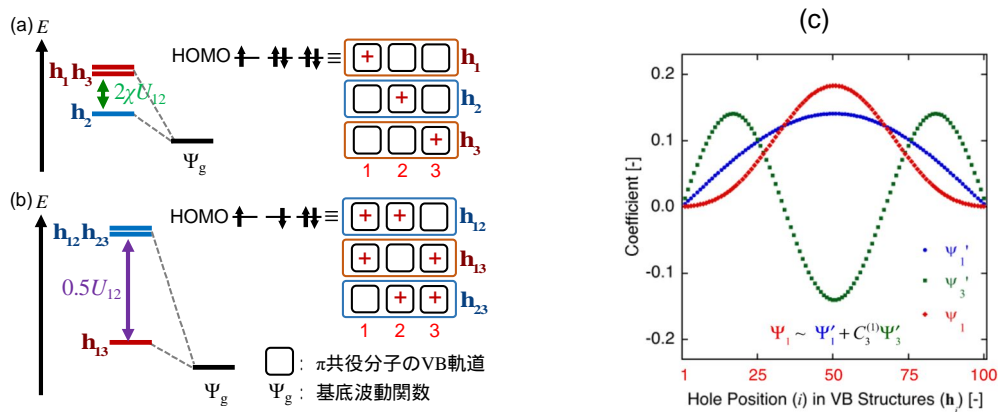


図 1. 軌道広がり効果を介した VB 配置間相互作用によるエネルギーと波動関数への影響

モノカチオン状態で軌道広がりを無視すると、正電荷の位置が異なる 3 つの VB 配置 ( $h_1, h_2, h_3$ ) は縮退する。この場合は、炭素 3 つからなる直鎖  $\pi$  共役分子のヒュッケル MO 計算と類似した問題に帰着され、解析的に各単量体の電荷 ( $q_i, i = 1, 2, 3$  は分子サイト番号) を得ることができ、中央の単量体の電荷 ( $q_2 = 0.5$ ) が両端の電荷 ( $q_1 = q_3 = 0.25$ ) の 2 倍になる結果が得られる。しかしながら、前述の実験結果からは、中央と両端の正電荷分布の差はもっと大きい。ここに軌道広がり効果 ( $2\chi U_{12}$ ) を考慮すると、中央に正電荷を持つ VB 配置 ( $h_2$ ) が相対的に安定化されるため、より中央の単量体が正に帯電した電荷分布になり、実験結果に近づく。さらに、軌道広がり項を摂動項とした摂動論により、一般の  $N$  量体について電子状態を解析したところ、エネルギー的に高い励起配置が基底状態に取り込まれることで、中央部分の振幅が大きくなることで、波動関数

の節構造や分布から明らかになった(図1c)。この正電荷が中央に集中する効果は、軌道広がり効果が顕著な場合に大きくなる。これに対して、 $\pi$  共役分子 3 量体のジカチオン状態は、2 つの正電荷間の反発により、両端に正電荷を有する VB 配置( $h_{13}$ )が他の VB 配置( $h_{12}$ ,  $h_{23}$ )よりも相対的にかなり安定となるため、両端の単量体の電荷( $q_1$ ,  $q_3$ )が中央の単量体の電荷( $q_2$ )よりも大きくなると考えられる。以上の考察の妥当性は、通常量子化学計算に基づく電荷分布解析からも検証できた。本成果は Bull. Chem. Soc. Jpn. 誌に掲載された。

この軌道広がり項の電荷密度分布に対する効果は、端のある有限サイズの  $N$  量体の場合に現れるため、マイクロメゾ領域で重要な構造因子である。一方、無限系ではこの効果はバンドのエネルギーを変化させると考えられる。今後は有限サイズ系に対する量子化学計算や無限一次元系におけるバンド構造計算の結果などとの比較により、軌道広がり項の簡便な推算を行う方法論の開発も必要と考えられる。

### (b) $\pi$ 共役分子の積層系における HOMO-LUMO ギャップ消失の機構説明

本研究課題開始当初に、最も解析を進めたいと考えていたのが、単分子では弱い開殻性をもつ分子が相互作用することで、系全体における開殻性が上昇する現象である。忍久保らにより合成された反芳香族ポルフィリンである  $Ni^{II}$ -ノルコロールは、単量体で  $4n\pi$  反芳香族分子でありながら、高い安定性を示す特異な光・電子物性を示す分子である。その積層二量体の合成も報告されており、本課題においても方法の欄で説明した多参照摂動論に基づく電子状態計算の結果を透熱基底表示に変換し、電子構造を解析した。また、以前の代表者の研究では、積層距離の現象に伴い二量体の HOMO と LUMO が入れ替わる点が  $3 \text{ \AA}$  付近に存在し、その点では HOMO-LUMO ギャップが消失し、系の開殻性を表すジラジカル因子  $y$  が 1 の完全開殻状態となることを見出していた。これは分子積層に伴う開殻電子状態の発現と制御に繋がるため、その機構や条件を明らかにすることに取り組んだ。

このような状況の  $\pi$  共役分子の積層系は、分子内での共役 (TB 共役) と分子間での共役 (TS 共役) が拮抗する。そこで図2のように TB 共役系の分子が 2 箇所で TS 相互作用し、平行に積層したモデル (TB/TS ハイブリッド共役系) を考えた。すべて炭素-炭素単結合/二重結合の  $\pi$  電子共役で構築された場合のモデルはラダーモデルと呼ばれ、単純ヒュッケル法のレベルにおいて HOMO-LUMO ギャップが消失する条件は、数理科学的に明らかにされていた。しかし、 $\pi$  電子共役で構築されたモデルはラダーモデルの構造は四員環を一次元に縮環させた構造であり、安定な系として単離することは難しいことが量子化学計算から予想されていた。類似の共役構造を、分子集合系を使って構築したものが、図2のモデルである。

このモデルでは、TB および TS 共役部分の共役の強さを、ヒュッケル MO 法の結合積分に相当する量  $\beta_{TB}$ ,  $\beta_{TS}$  により表すとすると、一般に  $\beta_{TB} \neq \beta_{TS}$  である。系全体への電子の非局在性や HOMO-LUMO ギャップ ( $\Delta\epsilon_{HL}$ ) はその比  $\beta_{TB}/\beta_{TS}$  に応じて変化すると考えられる。 $\beta$  に相当する量を具体的な TB 共役系の分子や積層距離において推算することは可能であるが、 $\beta$  はエネルギーの次元を持つ量であり、異なる系を同じ方法で推算のが難しく、一般性に欠ける。そこで、より容易に計算でき系に対する結果の依存性が小さい、より一般的な指標である無次元のジラジカル因子  $y$  を用いて、 $\beta_{TB}/\beta_{TS} \sim (1-y_{TB})/(1-y_{TS})$  と近似できると仮定し、系全体の  $\Delta\epsilon_{HL}$  が 0 となるための  $y_{TB}$  と  $y_{TS}$  の条件式を導出した。 $y_{TB}$  は TB 共役系の分子種により、 $y_{TS}$  は分子種と分子間の積層距離により決まるが、これは量子化学計算で容易に見積ることが出来る。条件式の妥当性を検証するため、*p*-quinodimethane など種々の TB 共役系の積層距離を変えたモデルを構築し、スピン射影(P)UHF レベルで  $y_{TB}$  と  $y_{TS}$ 、ならびに系全体の  $y_{total}$  を計算した。 $y_{total} = 1$  (つまり  $\Delta\epsilon_{HL} \sim 0$ ) となる場合の  $y_{TB}$  と  $y_{TS}$  は、前述の条件式の直線付近にプロットされ(図2)、導出した条件式は、 $\Delta\epsilon_{HL} \sim 0$  となる積層距離の予測に活用できることが示された。前述した、 $\beta_{TB}/\beta_{TS} \sim (1-y_{TB})/(1-y_{TS})$  という近似は、ジラジカル因子が中間~大きな領域で成り立つ。

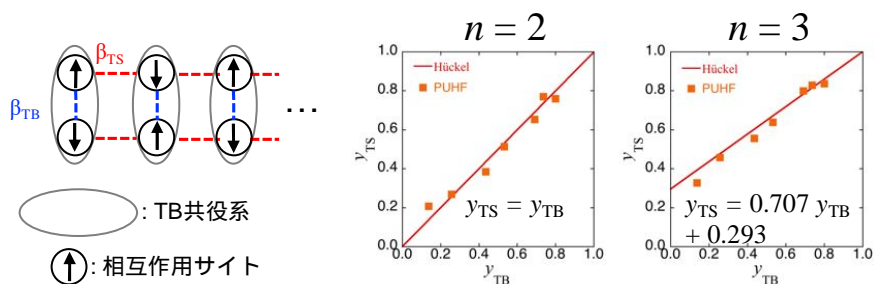


図2. TB/TS ハイブリッド系における HOMO-LUMO ギャップが消失する条件

得られた結果から導かれる重要な結論として、単分子のジラジカル因子が中程度の領域の分子であっても、積層により系全体の HOMO-LUMO ギャップが消失し、ジラジカル因子が 1 に近づく条件が見出されることにある。この  $y$  の計算は非常に簡便であり、 $y$  の条件は積層距離の条



件に直すことができる。すなわち、与えられるジラジカル分子について、どのような距離で積層させれば HOMO-LUMO ギャップが消失するか、この条件式から見積もることが可能となった。これらは、開殻分子からなる新奇光機能マクロ物質の量子設計指針の構築という目的において重要な成果であるといえる。本成果は Chem. Phys. Lett. 誌に掲載された。

### (c) 強開殻分子の一次元系における三次非線形光学応答の解析

レーザー光などの強い光を物質に照射した際に生じる三次非線形光学(Nonlinear Optics; NLO)現象は、超高速スイッチングや三次元メモリなど光情報通信デバイスへの応用に期待されている。分子性物質の三次 NLO 応答は、分子固有の物性量である第二超分極率  $\gamma$  により記述されるため、高効率三次 NLO 材料の実現には、 $\gamma$  値制御のための物質設計が必要である。中野らにより開殻性の指標であるジラジカル因子  $y$  [0 (閉殻)  $\leq y \leq 1$  (完全開殻)] と  $\gamma$  の関係が明らかにされ、中間的な  $y$  の領域で  $\gamma$  が増加するという分子レベルの「 $y$ - $\gamma$  相関」が明らかにされた。この相関に基づいて、種々の中間ジラジカル系が設計・合成されている。

中性  $\pi$  ラジカルであるフェナレニル (PLY) は、置換基の種類により 3.1 Å 程度に近接した  $\pi$  二量体を形成し、全体で中間ジラジカル系として振る舞うため、前述した分子レベルの「 $y$ - $\gamma$  相関」が適用可能である。このような強い分子間(ここでは  $\pi$  二量体間)相互作用が働く中性  $\pi$  ラジカルの積層集合系や分子性結晶における分子レベルの「 $y$ - $\gamma$  相関」の範囲範囲や、適用範囲を超える場合の集合系特有の電子状態-三次 NLO 物性相関を明らかにすることを目指した。以前の検討では、後述する  $y$  の平均値( $y_{av}$ )や積層距離に基づく議論がなされ、マクロ系の三次 NLO 応答が開殻分子の NLO 材料を凌駕し、共役ポリマー系に匹敵する可能性も示唆されていた。本研究では新たに、二量体間の相互作用を  $y$  に基づき議論する評価指標の導入を検討した。

PLY 二量体モデルをもとに構築した一次元  $\pi$  積層モデルに対する量子化学計算を行った。PLY 単量体を UB3LYP/6-31G\* レベルで構造最適化し、二量体モデルでは積層距離  $d_0$  [Å] で、一次元  $\pi$  積層モデルでは二量体内  $d_0$  [Å]、二量体間  $d_1$  [Å] ( $d_0 \leq d_1$ ) の距離で一次的に積層した構造を持つ。PLY 二量体は、ジラジカル系とみなせばその開殻性を 1 個の  $y$  ( $= y_0$ ) で特徴づけることができ、 $d_0$  の減少に伴い  $y$  は 1 から 0 へと低下する。 $N$  量体では  $N/2$  個の  $y$  ( $y_i: i=0 \sim N/2-1$ ) を定義できる。 $y_i$  は HOMO  $-i$  と LUMO  $+i$  のギャップに対応するため、 $y_i$  の算術平均をとった平均ジラジカル因子  $y_{av}(N)$  は  $N$  量体全体の、 $N \rightarrow \infty$  の極限における収束値は一次元  $\pi$  積層結晶の平均的な開殻性をそれぞれ表すと考えられる。

次に  $N=4$  を例に、二量体間の相互作用の影響を考える。 $d_0$  を固定して  $d_1 = \infty$  (相互作用のない極限) に取ると  $y_0 = y_1$  となり、その値は二量体で距離を  $d_0$  とした場合の  $y$  に一致する。そこから  $d_1$  を減少させ二量体間の相互作用を強くすると、4 量体の軌道が相互作用で分裂し  $y_0 \neq y_1$  となる。 $N \rightarrow \infty$  の一次元系ではバンド構造を形成し、 $y_i$  がとりうる値は幅を持つが、この幅が二量体間の相互作用の強さに対応すると考えられる。そこで  $y_{av}$  に加え、新たに  $y_i$  の標準偏差の  $N \rightarrow \infty$  に対する収束値  $y_{SD}$  を導入し、これらと  $\gamma$  との相関関係を検討した。 $\gamma$  は、周期境界条件を課した量子化学計算であるバンド計算と解析微分法により算出した。 $\gamma$  の計算には LC-UBLYP ( $\mu = 0.47$ ) /6-31G\*法を、 $y$  の計算には PUHF/6-31G\*法を用いた。

二量体モデルで  $d_0 = 3.2$  Å とすると、 $y = 0.60$ 、 $\gamma = 6.1 \times 10^4$  a.u. という結果が得られた。次に  $d_0 = 3.2$  Å で固定し、積層距離の交替比  $d_1 / d_0 = 1.0, 1.2, 2.0$  とした分子配置の一次元  $\pi$  積層モデルで計算を行ったところ、それぞれ  $y_{av} = 0.55, 0.60, 0.60$  という結果が得られ、平均の開殻性はいずれも二量体での開殻性と同程度であった。そこで、各一次元  $\pi$  積層モデルにおいて二量体あたりの  $\gamma$  を計算した。その結果、 $y_{av}$  が同程度でも  $d_1 / d_0$  に近づくと  $\gamma$  が増大すること、 $\gamma$  の増大率は  $y_{SD}$  とよい相関が見られることがわかった。以上の結果から、一次元  $\pi$  積層系では、 $y_{av}$  に加えて  $y_{SD}$  を用いて  $\gamma$  との関係を議論すべきであること、それに基づく集合系の設計が可能であることが示唆された。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計17件（うち査読付論文 17件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Mori Sakura, Moles Quintero Sergio, Tabaka Naoki, Kishi Ryohei, Gonzalez Nunez Raul, Harbuzaru Alexandra, Ponce Ortiz Rocio, Martin Beloqui Jose, Suzuki Shuichi, Kitamura Chitoshi, Gomez Garcia Carlos J., Dai Yasi, Negri Fabrizia, Nakano Masayoshi, Kato Shin ichiro, Casado Juan	4. 巻 61
2. 論文標題 Medium Diradical Character, Small Hole and Electron Reorganization Energies and Ambipolar Transistors in Difluorenoheteroles	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202206680
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202206680	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 Hashimoto Shingo, Kishi Ryohei, Tahara Kazukuni	4. 巻 46
2. 論文標題 Theoretical study on the structures, electronic properties, and aromaticity of thia[4]circulenes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 New Journal of Chemistry	6. 最初と最後の頁 22703 ~ 22714
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2NJ04359A	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 Nishiuchi Tomohiko, Makihara Yuta, Kishi Ryohei, Sato Hiroyasu, Kubo Takashi	4. 巻 36
2. 論文標題 Stacked antiaromaticity in the congested space between the aromatic rings in the anthracene dimer	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physical Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e4451
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/poc.4451	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 Tonami Takayoshi, Nakano Masayoshi, Kishi Ryohei, Kitagawa Yasutaka	4. 巻 813
2. 論文標題 Effects of introducing nitrogen atoms into oligoacene skeleton on vibronic coupling and singlet fission dynamics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 140311 ~ 140311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/J.CPLETT.2023.140311	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 Tonami Takayoshi, Miyamoto Hajime, Nakano Masayoshi, Kishi Ryohei, Kitagawa Yasutaka	4. 巻 127
2. 論文標題 Theoretical Study on Thermal Structural Fluctuation Effects of Intermolecular Configurations on Singlet Fission in Pentacene Crystal Models	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 1883 ~ 1893
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c08864	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 Konishi Akihito, Horii Koki, Iwasa Haruna, Okada Yui, Kishi Ryohei, Nakano Masayoshi, Yasuda Makoto	4. 巻 16
2. 論文標題 Characterization of Benzo[a]naphtho[2,3 f]pentalene: Interrelation between Open shell and Antiaromatic Characters Governed by Mode of the Quinoidal Subunit and Molecular Symmetry	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 1553 ~ 1561
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.202100398	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 Kubo Takashi, Suga Yuki, Hashizume Daisuke, Suzuki Hiroki, Miyamoto Tatsuya, Okamoto Hiroshi, Kishi Ryohei, Nakano Masayoshi	4. 巻 143
2. 論文標題 Long Carbon-Carbon Bonding beyond 2 Å in Tris(9-fluorenylidene)methane	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 14360 ~ 14366
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.1c07431	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 Barker Joshua E., Price Tavis W., Karas Lucas J., Kishi Ryohei, MacMillan Samantha N., Zakharov Lev N., Gomez Garcia Carlos J., Wu Judy I., Nakano Masayoshi, Haley Michael M.	4. 巻 60
2. 論文標題 A Tale of Two Isomers: Enhanced Antiaromaticity/Diradical Character versus Deleterious Ring Opening of Benzofuran fused s Indacenes and Dicyclopenta[b,g]naphthalenes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 22385 ~ 22392
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202107855	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 Miyoshi Hirokazu, Sugiura Ryosuke, Kishi Ryohei, Spisak Sarah N., Wei Zheng, Muranaka Atsuya, Uchiyama Masanobu, Kobayashi Nagao, Chatterjee Shreyam, Ie Yutaka, Hisaki Ichiro, Petrukhina Marina A., Nishinaga Tohru, Nakano Masayoshi, Tobe Yoshito	4. 巻 61
2. 論文標題 Dianion and Dication of Tetracyclopentatetraphenylene as Decoupled Annulene within an Annulene Models	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202115316	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 Horii Koki, Kishi Ryohei, Nakano Masayoshi, Shiomi Daisuke, Sato Kazunobu, Takui Takeji, Konishi Akihito, Yasuda Makoto	4. 巻 144
2. 論文標題 Bis-periazulene (Cyclohepta[def]fluorene) as a Nonalternant Isomer of Pyrene: Synthesis and Characterization of Its Triaryl Derivatives	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 3370 ~ 3375
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c00476	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 Kodama Takuya, Uchida Kenta, Nakasuji Chihiro, Kishi Ryohei, Kitagawa Yasutaka, Tobisu Mamoru	4. 巻 62
2. 論文標題 Open-Shell Germylene Stabilized by a Phenalenyl-Based Ligand	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 7861 ~ 7867
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.3c00583	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 Pomiklo Dominika, Pietrzak Anna, Kishi Ryohei, Kaszynski Piotr	4. 巻 7
2. 論文標題 Bi-Blatter diradicals: convenient access to regioisomers with tunable electronic and magnetic properties	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Materials Chemistry Frontiers	6. 最初と最後の頁 4928 ~ 4943
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3qm00666b	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 Mizuno Yusuke, Nogata Akira, Suzuki Mitsuharu, Nakayama Ken-ichi, Hisaki Ichiro, Kishi Ryohei, Konishi Akihito, Yasuda Makoto	4. 巻 145
2. 論文標題 Synthesis and Characterization of Dibenzothieno[a,f]pentalenes Enabling Large Antiaromaticity and Moderate Open-Shell Character through a Small Energy Barrier for Bond-Shift Valence Tautomerization	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 20595 ~ 20609
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.3c07356	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 Amamizu Naoka, Nishida Mitsuhiro, Sasaki Keisuke, Kishi Ryohei, Kitagawa Yasutaka	4. 巻 14
2. 論文標題 Theoretical Study on the Open-Shell Electronic Structure and Electron Conductivity of [18]Annulene as a Molecular Parallel Circuit Model	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nanomaterials	6. 最初と最後の頁 98 ~ 98
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/nano14010098	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 Yoshida Wataru, Shigeta Yasuteru, Matsui Hiroshi, Miyamoto Hajime, Kishi Ryohei, Kitagawa Yasutaka	4. 巻 97
2. 論文標題 Theoretical study on molecular charge populations of 1D $\pi$ -stacked multimers in neutral and electron oxidation states	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 uoae009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/bulcsj/uoae009	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 Wang Kaisheng, Ito Satoru, Ren Shuang, Shimizu Daiki, Fukui Norihito, Kishi Ryohei, Liu Qiang, Osuka Atsuhiko, Song Jianxin, Shinokubo Hiroshi	4. 巻 63
2. 論文標題 A Triply Linked Porphyrin Norcorrole Hybrid with Singlet Diradical Character	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202401233
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202401233	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 Yoshida Wataru, Miyamoto Hajime, Shoda Jinki, Matsui Hiroshi, Sugimori Ryota, Kishi Ryohei, Kitagawa Yasutaka	4. 巻 842
2. 論文標題 Theoretical study on open-shell electronic structures of through-bond/through-space hybrid conjugated ladder graphs	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 141196 - 141196
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2024.141196	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 -

[学会発表] 計160件(うち招待講演 2件/うち国際学会 36件)

1. 発表者名 Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Quantum Chemical Analysis on Diradical Properties of Open-Shell -Conjugated Molecular Systems
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Seiya Tsuchida, Ryohei Kishi, Ryota Sakai, Ikeuchi Masato, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Structure-Property Relationship in Open-Shell Fused-Ring Conjugated Molecules Involving both Five- and Eight-Membered Rings
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Chihiro Nakasuji, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Electronic Structures of Neutral Complexes of Low-Valent Group 14 Elements Supported by -Diketimate Ligand
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hajime Miyamoto, Kenji Okada, Kazuaki Tokuyama, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical study on singlet fission dynamics in multiple ring-shaped aggregate models
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masako Yokoyama, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Excitation Properties of Phenalenyl Dimer Models Based on Multi-Reference Perturbation Theory
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryota Sakai, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Spin- and Charge-Polarized Electronic Structures and Properties of Fused-Ring Conjugated Molecules Involving Azulene Units
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryota Sugimori, Ryohei Kish, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical Study On The Open-Shell Electronic Structure and Third-Order Nonlinear Optical Properties of BN-Substituted Oligoacenes
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Jinki Shoda, Ryohei Kishi, Masako Yokoyama, Wataru Yoshida, Masato Ikeuchi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Open-Shell Character and Nonlinear Optical Properties of One-Dimensional $\pi$ -Stacked Systems Composed of Monoradical Species
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Naoki Shirai, Wataru Yoshida, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical study on open-shell characters and third-order nonlinear optical properties of carbazole dimers in the neutral and charged states
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takayoshi Tonami, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Vibronic Couplings of Excited States Contributing to Singlet Fission in Pentacene Crystal
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masato Ikeuchi, Ryohei Kishi, Ryota Sugimori, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical Study on Open-Shell Electronic Structures of Closely $\pi$ -Stacked Antiaromatic Molecules
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryohei Kishi
2. 発表標題 Quantum chemical study on electronic structures and properties of closely-stacked open-shell molecules
3. 学会等名 Strasbourg-Japan USIAS symposium on Condensed Conjugation (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 内田 健太, 兒玉 拓也, 中筋 千尋, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由, 鳶巢 守
2. 発表標題 フェナレニル骨格を配位子に有するゲルミレンの合成と反応性
3. 学会等名 錯体化学会 第72回討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉森 亮太, 池内 雅登, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 近接積層反芳香族分子集合系のエネルギー安定化機構と開殻性の関係に関する理論研究
3. 学会等名 令和4年度 第2回高密度共役領域会議
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 島田 魁智, 坂井 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ピス-ベリアズレンの連結二量体モデルの電子構造についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 池内 雅登, 杉森 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 反芳香族分子の近接 積層多量体における分子内構造についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中筋 千尋, 岸 亮平, 北河 康隆, 内田 健太, 兒玉 拓也, 鷲巢 守
2. 発表標題 フェナレニル型配位子を有するゲルミレン錯体の二量体構造と電子状態に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 航, 重田 育照, 松井 啓史, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 有限 共役分子集積体における電荷分布の積層構造依存性に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ジフェノキノ骨格を含有する縮合環化合物の一重項分裂過程に関する低励起状態の理論研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年



1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 一次元分子集合系における一重項分裂ダイナミクスに関する理論研究：相関三重項対の空間分布の集合系構造依存性
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 杉森 亮太, 池内 雅登, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 近接した 積層反芳香族分子集合系における開殻性と分子間相互作用エネルギーの関係についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中山 直哉, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 らせん状骨格を有する開殻一重項分子の一重項分裂過程に関する電子励起状態についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 航, 松井 啓史, 中野 雅由, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 原子価結合理論に基づく多電子第二超分極率密度解析
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 池内 雅登, 岸 亮平, 杉森 亮太, 中野 雅由, 北河 康隆
2. 発表標題 反芳香族分子の近接 積層多量体の電子構造に関する理論研究
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 横山 麻紗子, 中野 雅由, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 多参照摂動論に基づくフェナレニル 積層集合系の励起特性計算
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 徳山 和明, 中野 雅由, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 並列型マルチリング分子集合系モデルにおける一重項分裂ダイナミクスの構造-特性相関に関する理論研究
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 當波 孝凱, 中野 雅由, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 一重項分裂過程に寄与する励起状態の振電相互作用: フラグメント分割法に基づく計算/解析
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉森 亮太, 當波 孝凱, 吉田 航, 坂井 亮太, 中野 雅由, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 対称 2 電子 2 軌道モデルに基づく開殻 BN 置換アントラセンの三次非線形光学特性に関する理論研究
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡田 健治, 中野 雅由, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ポウル型分子の一次元集合系における一重項分裂に関する理論研究
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 北河 康隆, 徳山 和明, 甘水 君佳, 岸 亮平
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスを用いた光増感剤の還元電位設計
3. 学会等名 化学工学会第 5 3 回秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 當波 孝凱, 中野 雅由, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ペンタセン誘導体の一重項分裂過程における振電相互作用に関する理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 正田 迅己, 吉田 航, 池内 雅登, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 開殻分子からなる一次元 積層系のバンド構造と光応答特性に関する理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田 航, 重田 育照, 松井 啓史, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 原子価結合(VB)配置間相互作用モデルに基づく一次元開殻分子集合系の電子構造についての理論研究: VB軌道の空間的広がり効果
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 坂井 亮太, 土田 聖也, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 一重項分裂過程における分子内電荷分極と分子間相互作用の関係についての理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 土田 聖也, 坂井 亮太, 池内 雅登, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 八員環を含む開殻縮環共役分子系における構造-物性相関に関する理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中筋 千尋, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 -diketimate配位子を基盤とした低原子価14属元素(C, Si, Ge)中性錯体の電子状態に関する理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉森 亮太, 池内 雅登, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 反芳香族分子の 積層集合系における芳香族性、開殻性と安定化エネルギーの関係についての理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ボウル型 共役分子集合系の一重項分裂過程に關与する励起状態の振電相互作用に関する理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 池内 雅登, 杉森 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 近接 積層反芳香族分子集合系の電子構造の分子数依存性に関する理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岸 亮平, 岡田 健治, 杉森 亮太, 池内 雅登, 北河 康隆
2. 発表標題 反芳香族分子の二量体の電子構造についての理論研究: 軌道相互作用および配置間相互作用に基づく解析
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 複数の環状構造からなる分子集合系の一重項分裂ダイナミクスに関する理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 白井 尚樹, 吉田 航, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 カルバゾールオリゴマーの開殻性と三次非線形光学物性の連結位置および荷電状態依存性に関する理論研究
3. 学会等名 第16回分子科学討論会2022横浜
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 甘水 君佳, 佐々木 啓介, 長 奎吾, 上村 泰五, 徳山 和明, 林 優太, 津田 雅大, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 単分子トランジスタ設計指針構築に向けたパドルホイール型二核錯体の単分子電気伝導性に関する理論研究
3. 学会等名 錯体化学会 第72回討論会
4. 発表年 2022年



1. 発表者名 島田 魁智, 坂井 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ビス-ペリアズレン連結二量体モデルの軌道相互作用・開殻性についての理論研究
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 一次元不均一分子集合系における一重項分裂ダイナミクスの構造-特性相関に関する理論研究
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 杉森 亮太, 池内 雅登, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 近接積層した反芳香族分子集合系の分子間相互作用エネルギーと開殻性の関係に関する理論研究
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 土田 聖也, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 八員環を含有する開殻縮環共役分子の構造と電子状態に関する理論研究
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 航, 重田 育照, 松井 啓史, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 原子価結合理論に基づく有限 共役分子集積体における電荷分布の積層構造依存性に関する理論研究
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ジフェノキノ骨格を含有する縮合環化合物のシングレットフィッション過程に関する低励起 状態に関する理論研究
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中山 直哉, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ヘリセン骨格を有する開殻一重項分子の一重項-分裂過程に関する電子励起状態についての理論研究
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中筋 千尋, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 -diketimate配位子を持つ低原子価14属元素錯体の構造と電子状態に関する理論研究
3. 学会等名 第18回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 當波 孝凱, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ペンタセン分子集合系における一重項分裂ダイナミクスに関する理論研究
3. 学会等名 凝縮系の理論化学研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryohei Kishi, Yosuke Shimizu, Masato Ikeuchi, Jinki Shoda, Wataru Yoshida, Masayoshi Nakano
2. 発表標題 Theoretical study on open-shell characters and properties of linearly and circularly conjugated systems
3. 学会等名 Pacifichem2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Wataru Yoshida, Hiroshi Matsui, Ryota Sugimori, Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano
2. 発表標題 Theoretical study on nonlinear optical properties of symmetric one-dimensional neutral tetraradicaloids
3. 学会等名 Pacifichem2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Tatsuki Konishi, Takashi Kubo, Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano, Kenji Kamada
2. 発表標題 Enhancement of two-photon absorption by intermolecular multi-radical interaction in single crystal of open shell molecule
3. 学会等名 Pacifichem2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田 航, 松井 啓史, 杉森 亮太, 岸 亮平, 中野 雅由
2. 発表標題 対称1次元4サイト4電子原子価結合配置間相互作用(VBCI)モデルを用いたテトララジカロイドにおける開殻性と三次非線形光学物性の相関の解析
3. 学会等名 第23回理論化学討論会(オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 池内 雅登, 岸 亮平, 杉浦 亮介, 吉田 航, 清水 陽介, 正田 迅己, 中野 雅由
2. 発表標題 反芳香族分子の 三量体における構造, 芳香族性, 開殻性の相関に関する理論研究
3. 学会等名 第23回理論化学討論会(オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岸 亮平, 正田 迅己, 横山 麻紗子, 吉田 航, 清水 陽介, 池内 雅登, 中野 雅由
2. 発表標題 スピン非制限 CC2 法による一重項開殻分子系の三次非線形光学物性計算についての理論研究
3. 学会等名 第23回理論化学討論会(オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 正田 迅己, 岸 亮平, 池内 雅登, 清水 陽介, 杉浦 亮介, 吉田 航, 中野 雅由
2. 発表標題 一次元 積層開殻分子集合系における開殻性と三次非線形光学物性の相関についての理論研究
3. 学会等名 第23回理論化学討論会(オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水 陽介, 岸 亮平, 吉田 航, 池内 雅登, 正田 迅己, 中野 雅由
2. 発表標題 Dicyclopenta-fusedacene の 2電子酸化還元状態およびヘテロ置換系における開殻性の鎖長依存性についての理論研究
3. 学会等名 第23回理論化学討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田 航, 松井 啓史, 杉森 亮太, 岸 亮平, 中野 雅由
2. 発表標題 一次元マルチラジカロイドにおける第二超分極率のサイズおよびジラジカル因子依存性の機構に関する理論研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 横山 麻紗子, 岸 亮平, 中野 雅由
2. 発表標題 開殻一重項分子の二光子吸収特性の計算手法依存性についての理論研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 徳山 和明, 中野 雅由
2. 発表標題 Slip-stack-like型ペンタセン環状集合系の一重項分裂ダイナミクスにおけるサイズ及び配向依存性
3. 学会等名 第15回分子科学討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 池内 雅登, 岸 亮平, 吉田 航, 清水 陽介, 正田 迅己, 白井 尚樹, 中野 雅由
2. 発表標題 積層反芳香族分子集合系における芳香族性と開殻性の積層構造依存性に関する理論研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岸 亮平, 吉田 航, 横山 麻紗子, 清水 陽介, 池内 雅登, 正田 迅己, 白井 尚樹, 中野 雅由
2. 発表標題 開殻分子二量体の電子構造に対する価電子配置間相互作用モデルの適用についての理論研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水 陽介, 岸 亮平, 吉田 航, 池内 雅登, 正田 迅己, 白井 尚樹, 中野 雅由
2. 発表標題 縮環反芳香族分子系の開殻電子構造と光応答物性に対する電荷状態依存性についての理論研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 正田 迅己, 岸 亮平, 池内 雅登, 清水 陽介, 白井 尚樹, 杉浦 亮介, 吉田 航, 中野 雅由
2. 発表標題 一次元 積層開殻分子集合系の開殻性と光応答特性の分子数および分子配置依存性に関する理論研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 坂井 亮太, 杉森 亮太, 岡田 健治, 土田 聖也, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 スピン分極および電荷分極を併せ持つアズレン縮環共役分子の構造物性相関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 2022年

1. 発表者名 土田 聖也, 岸 亮平, 坂井 亮太, 池内 雅登, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 八員環を含む開殻縮環共役分子の構造、電子状態に関する理論研究
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 2022年

1. 発表者名 清水 陽介, 岸 亮平, 吉田 航, 池内 雅登, 正田 迅己, 白井 尚樹, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 Dicyclopenta-fused acene の開殻電子構造と三次非線形光学物性に対する電荷状態依存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 2022年

1. 発表者名 正田 迅己, 岸 亮平, 横山 麻紗子, 吉田 航, 池内 雅登, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 開殻分子 積層一次元集合系の電子構造と光応答物性の分子配置依存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 2022年

1. 発表者名 當波 孝凱, 岡田 健治, 宮本 孟, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 外部静電場が一重項分裂ダイナミクスに与える影響に関する理論研究
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 2022年

1. 発表者名 池内 雅登, 岸 亮平, 杉森 亮太, 正田 迅己, 土田 聖也, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 反芳香族分子の 積層多量体における芳香族性の分子数および分子間距離依存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 2022年

1. 発表者名 杉森 亮太, 當波 孝凱, 坂井 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 ジアザジボラ置換オリゴアセン類縁体の開殻性及び非線形光学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 2022年

1. 発表者名 岡田 健治, 徳山 和明, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 ポール型分子からなる一次元集合系モデルにおけるシングレットフィッションダイナミクスに関する理論研究
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 2022年

1. 発表者名 白井 尚樹, 吉田 航, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 カルbazoolオリゴマーの構造、電荷状態、開殻性の相関に関する理論研究
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 2022年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 徳山 和明, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 環状分子集合系におけるシングレットフィッションダイナミクスの構造-特性相関に関する理論研究
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 2022年

1. 発表者名 清水 陽介, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 Dicyclopenta-fused aceneの2電子酸化還元状態の開殻電子構造についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 土田 聖也, 岸 亮平, 坂井 亮太, 池内 雅登, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 八員環を含む開殻縮環共役分子の構造、電子状態、物性に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徳山 和明, 宮本 孟, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 スリップスタック型およびヘリングボーン型配置のペンタセン一次元集合系モデルにおける一重項分裂ダイナミクス
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 白井 尚樹, 吉田 航, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 カルバゾールオリゴマーの電子酸化状態における開殻性と三次非線形光学物性の構造依存性に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 當波 孝凱, 岡田 健治, 宮本 孟, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 一重項分裂過程に寄与する励起状態の振電相互作用についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡田 健治, 徳山 和明, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 ポウル型分子の一次元集合系におけるシングレットフィッシュンダイナミクスに関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 徳山 和明, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 ペンタセンマルチリング集合系におけるシングレットフィッションダイナミクスに関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 横山 麻紗子, 岸 亮平, 正田 迅己, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 フェナレニル分子からなる 積層集合系の励起特性に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中筋 千尋, 岸 亮平, 吉田 航, 北河 康隆, 中野 雅由, 兒玉 拓也, 鷲巢 守
2. 発表標題 配位結合部位を導入した縮環共役分子の電子構造についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 池内 雅登, 岸 亮平, 杉森 亮太, 正田 迅己, 土田 聖也, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 反芳香族分子の 積層多量体における芳香族性と開殻性の積層構造依存性に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉森 亮太, 當波 孝凱, 坂井 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 BN置換オリゴアセン類縁体の開殻性及び非線形光学物性に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 坂井 亮太, 杉森 亮太, 岡田 健治, 土田 聖也, 岸 亮平, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 スピンおよび電荷分極型共鳴構造を持つアズレン縮環分子の電子構造と物性についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 正田 迅己, 岸 亮平, 横山 麻紗子, 吉田 航, 池内 雅登, 北河 康隆, 中野 雅由
2. 発表標題 積層開殻分子集合系の電子構造と光応答物性の分子配置依存性についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会(2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryohei Kishi
2. 発表標題 Theoretical Study on Structures of Unpaired Electrons in Open-Shell Systems
3. 学会等名 10th Pacific Symposium on Radical Chemistry (PSRC-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年



1. 発表者名 Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Valence configuration interaction analysis for excitation properties of open-shell singlet molecules and molecular aggregates
3. 学会等名 The 31st International Conference on Photochemistry (ICP2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 航, 重田 育照, 松井 啓史, 宮本 孟, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 共役分子の有限集積体の電子酸化状態における電荷密度分布に関する理論研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 島田 魁智, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ピス-ベリアズレンの連結二量体モデルにおける構造・電子状態についての理論研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 横山 麻紗子, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 開殻フェナレニル 積層多量体の二光子吸収特性の積層距離依存性についての理論研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ジフェノキノ骨格を含有する縮環系の一重項分裂過程に関する低励起状態に関する理論研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岸 亮平, 正田 迅己, 吉田 航, 北河 康隆
2. 発表標題 一次元開殻分子集合系の開殻性と三次非線形光学物性の解析についての理論研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 杉森 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 積層反芳香族分子二量体の核独立化学シフト計算
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 有限直鎖分子集合系における局所的な相互作用の変化が一重項分裂ダイナミクスにもたらす影響についての理論研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中山 直哉, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ヘリセン骨格を有する分子の一重項分裂過程に関する電子励起状態についての理論研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中筋 千尋, 岸 亮平, 北河 康隆, 内田 健太, 兒玉 拓也, 鷲巢 守
2. 発表標題 フェナレニル型配位子を有するゲルミレン錯体の二量体構造に関する理論研究
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 局所的に分子間相互作用が変化した一次元分子集合系モデルにおけるシングレットフィッシュンダイナミクスに関する理論研究
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 杉森 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 積層した反芳香族分子二量体の磁場応答物性の計算と解析
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 航, 宮本 孟, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 一次元ジラジカル分子集合体の開殻性に関する理論研究
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 島田 魁智, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ビス-ペリアズレンの連結系における構造・電子状態に関する理論研究
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中筋 千尋, 岸 亮平, 北河 康隆, 内田 健太, 兒玉 拓也, 鷲巢 守
2. 発表標題 フェナレニル型配位子を有するゲルミン錯体の開殻電子構造に関する理論研究
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 土田 聖也, 杉森 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ペンタレン 拡張系における構造と電子状態の制御についての理論研究
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023大阪
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryohei Kishi, Ryota Sakai, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical study on structure-excitation property relationships in non-alternant isomers of [n]acenes
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry(TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Chihiro Nakasuji, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa, Kenta Uchida, Takuya Kodama, Mamoru Tobisu
2. 発表標題 Theoretical study on electronic structure of open-shell germylenes stabilized by a phenalenyl-based ligand
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry(TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kenji Okada, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Low-lying excited states of fused-ring diphenoquinones and their potential applications to singlet fission molecules
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry(TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Wataru Yoshida, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical study on charge density distributions of cationic multimers of $\pi$ -conjugated molecules
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry(TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Seiya Tsuchida, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Theoretical studies on electronic structures of open-shell $\pi$ -extended pentalenes
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry(TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryota Sugimori, Ryohei Kishi, Yasutaka Kitagawa
2. 発表標題 Calculations of magnetic response properties of $\pi$ -stacked dimers of antiaromatic molecules
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry(TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 島岡 諒, 中筋 千尋, 岸 亮平, 兒玉 拓也, 鷲巢 守, 北河 康隆
2. 発表標題 フェナレニル型配位子を有するゲルミレンにおける反応に関する理論研究
3. 学会等名 第19回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 川崎 愛矢, 中筋 千尋, 岸 亮平, 向井 虹渡, 兒玉 拓也, 鷲巢 守, 北河 康隆
2. 発表標題 フェナレニル型配位子を有するガリレンの励起状態計算
3. 学会等名 第19回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 杉森 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 実在反芳香族分子からなる近接 積層した二量体の安定化機構に関する理論研究
3. 学会等名 第19回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 局所的に分子間相互作用が変化した一次元分子集合系モデルにおける一重項分裂過程に関する理論研究
3. 学会等名 第19回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 島田 魁智, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ピス-ベリアズレンの連結二量体における電子状態に関する理論研究
3. 学会等名 第19回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 航, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 理論模型に基づく空間を介した共役系の電子状態の解析
3. 学会等名 研究会「凝縮系の理論化学」
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 川崎 愛矢, 中筋 千尋, 岸 亮平, 北河 康隆, 向井 虹渡, 兒玉 拓也, 鳶巢 守
2. 発表標題 フェナレニル型配位子を有するガリレンの紫外可視吸収スペクトルの量子化学計算
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 宮本 孟, 岡田 健治, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 有限次元分子集合系での一重項分裂過程と相関三重項対励起子の空間分布に関する理論研究
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 島田 魁智, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 ピス-ベリアズレン連結二量体の電子構造の荷電、スピン状態依存性についての理論研究
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 杉森 亮太, 岸 亮平, 北河 康隆
2. 発表標題 実在反芳香族分子の近接積層 二量体に対する量子化学計算に基づくエネルギー分割解析
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年



〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

大阪大学大学院基礎工学研究科量子化学工学Gホームページ  
<http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/nakano/result.html>  
大阪大学大学院基礎工学研究科量子化学工学グループHP  
<http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/nakano/index.html>

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			
スペイン	マラガ大学			
イタリア	ボローニャ大学			
米国	オレゴン大学	ニューヨーク州立大学	ヒューストン大学	
スペイン	バレンシア大学			
その他の国・地域(台湾)	国立陽明交通大学			