

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年5月30日現在

機関番号：14401  
 研究種目：基盤研究（B）  
 研究期間：2010～2012  
 課題番号：22350018  
 研究課題名（和文）ヘテロ原子修飾型開殻グラフェンの精密合成と物性開発  
 研究課題名（英文）Precise synthesis and properties of open-shell graphene fragments with heteroatomic modification

## 研究代表者

森田 靖（MORITA YASUSHI）  
 大阪大学・大学院理学研究科・准教授  
 研究者番号：70230133

研究成果の概要（和文）：開殻グラフェンフラグメントを基盤とした新しい電子・磁気機能の創出を目的とし、その部分骨格であるトリアンギュレンに三つの酸素官能基を導入したトリオキソトリアンギュレン（TOT）の誘導体の合成と物性解明を行った。置換基を変えることによりフロンティア軌道エネルギー準位や電子スピン密度分布を変調させ、分子自身の安定性、SOMO-SOMO 相互作用による積層性、酸化還元挙動の制御に成功した。

研究成果の概要（英文）：In quest of novel electronic-/magnetic materials based on open-shell graphene fragments, design and synthesis of trioxotriangulene (TOT) derivatives, air-stable organic neutral radicals with three oxygen atoms on a triangulene skeleton, and disclosure of their properties in the solution and solid state have been carried out. We have successfully controlled molecular stability,  $\pi$ -stacking mode by SOMO-SOMO interaction, redox ability in terms of modification of the frontier molecular orbitals and the electronic-spin density distribution by substituent effect in a controlled manner.

## 交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	6,500,000	1,950,000	8,450,000
2011年度	4,400,000	1,320,000	5,720,000
2012年度	4,200,000	1,260,000	5,460,000
年度			
年度			
総計	15,100,000	4,530,000	19,630,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学・有機化学

キーワード：構造有機化学、開殻有機分子、開殻グラフェンフラグメント、二次電池

## 1. 研究開始当初の背景

縮合多環構造を有する平面巨大  $\pi$  電子系物質であるグラフェンが最近注目されている。この物質は、高配向性熱分解グラファイトからの剥離により初めて合成され、次世代電子材料としての期待を集めている。グラフェンからすべての辺がジグザグ型になるように三角形を切り出した場合、フェナレニルやトリアンギュレンと呼ばれる開殻有機分子が

得られる（図1）。我々は、これらの分子を「開殻グラフェンフラグメント」と命名した。開殻有機分子は、電子スピン密度の分布様式により、「局在型」と「非局在型」に分類できる。「電子スピン局在型」の開殻有機分子は、古くから知られており、分子磁性体研究の発展に深く貢献をしてきた。一方、「スピン非局在型」の安定な開殻有機分子についての研究例は非常に少なく、我々が行って

る開殻グラフェンフラグメントを基盤とした「スピン非局在型」の開殻有機分子の合成研究は、世界的に高く評価されている。

トリアンギュレンを酸素原子で修飾したトリオキソトリアンギュレン (**TOT**) は、空气中で安定に取り扱える開殻有機分子 (中性ラジカル) としては世界最大の  $25\pi$  電子系を有しており、電子スピンは分子骨格全体に広く非局在化している (図 2)。**(t-Bu)<sub>3</sub>TOT** は、市販品から 5 段階、総収率 10% で合成が可能であり、空气中での分解点は  $300\text{ }^\circ\text{C}$  以上と極めて高い安定性を有する。また、中性ラジカル結晶としては非常に珍しい一次元カラム状構造を形成する (図 2)。結晶状態では高い電子易動度 ( $0.1\text{ cm}^2/\text{Vs}$ , n 型 FET 特性) と低エネルギー吸収 ( $1134\text{ nm}$ ,  $1.1\text{ eV}$ ) を示す。イソプロピル基を導入した誘導体の合成・単離にも成功し、置換基効果による分子の安定性や電子スピン構造の変化についての基礎的知見を集積してきた。

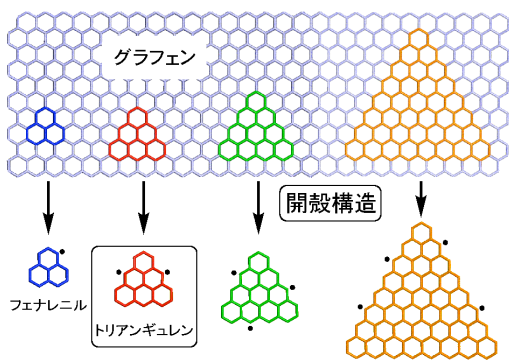


図 1. グラフェンから切り出した開殻有機分子

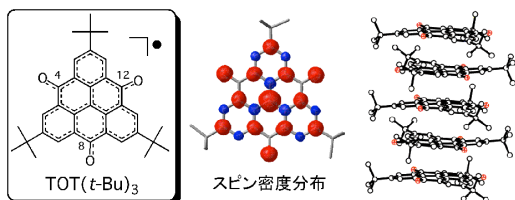


図 2. **(t-Bu)<sub>3</sub>TOT** の化学構造式、電子スピン密度分布、および結晶中での一次元カラム構造

## 2. 研究の目的

これまで得られた基礎的知見を基盤として、電子供与性 ( $\text{NH}_2$  基など) や電子受容性 ( $\text{COOH}$  基など) を置換した各種 **TOT** 誘導体 (図 3) を合成し、構造解析、各種物性測定を行い、電子的・磁氣的機能の創成を目指す。

**(t-Bu)<sub>3</sub>TOT** の *t*-ブチル基が置換している炭素原子上には、大きな正の電子スピン密度が存在する (図 2)。したがって、この位置へ電子供与性・受容性置換基を導入することで、単占分子軌道 (SOMO) および LUMO エネル

ギー準位や電子スピン密度分布を変調させることが可能である。さらに、 $\text{NH}_2$  基や  $\text{COOH}$  基は分子間での水素結合や金属イオンへの配位結合が可能であることから、**SOMO-SOMO** 相互作用による縦方向への積層性との複合化により、**TOT** の平面巨大  $\pi$  電子系と共役した横方向での電子的な相互作用に基づく高次元の集積構造の形成による新しい電子スピン物性の発現が期待できる。

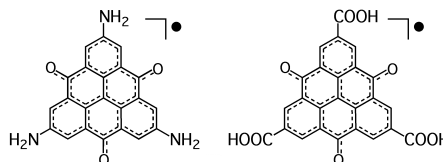


図 3. 本申請で合成する **TOT** 誘導体の代表例

## 3. 研究の方法

量子化学計算によると、各種 **TOT** 誘導体の **SOMO-LUMO** エネルギー差は  $0.4\text{--}0.7\text{ eV}$  であり、ペンタセンやフラーレン  $\text{C}_{60}$  の **HOMO-LUMO** エネルギー差 ( $2\text{ eV}$  以上) に比べて非常に小さいことが示唆された。 $\pi$  電子数が  $25$  個程度で、これほど極端に小さなフロンティア軌道エネルギー差を持つ有機分子はこれまでに未知である。**TOT** 誘導体間で比較した場合、**SOMO** のエネルギー準位は、電子供与性置換基 ( $\text{NH}_2$ ,  $\text{OCH}_3$ ) の場合は高く、電子受容性置換基 ( $\text{Br}$ ,  $\text{C}_6\text{F}_5$ ,  $\text{CN}$ ,  $\text{COOBu}$ ,  $\text{NO}_2$ ) の場合は低くなり、**SOMO-LUMO** エネルギー差はいずれの場合も **(t-Bu)<sub>3</sub>TOT** に比べて小さくなった (図 4)。この結果は、置換基効果により軌道エネルギー準位を効率的に制御できることを示唆している。

これらの分子の効果的な合成には、共通中間体である三個の臭素原子を有する **Br<sub>3</sub>TOT** の **OH** 体を合成し、置換基の交換反応により誘導化する手法が有効である (次項スキーム)。その方法が適用できない誘導体は、対応する**プロモベンゼン誘導体**を用いてトリフェニルメチル誘導体を経由して合成する。

合成した **TOT** 誘導体の電子スピン構造は、**ESR/ENDOR/TRIPLE** スペクトル測定により明らかにする。電子授受能を **CV** 法により調査し、量子計算によるエネルギー準位や

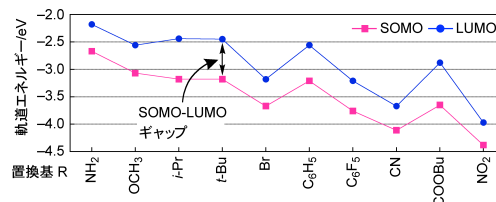
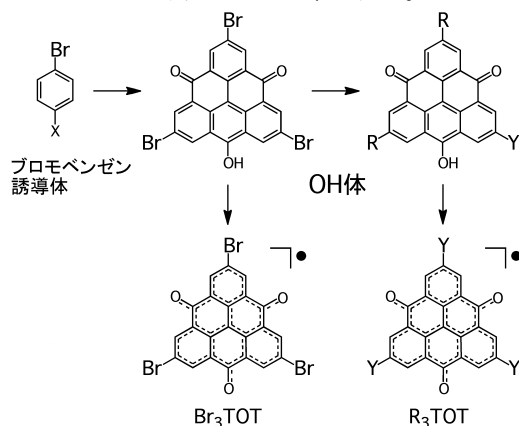


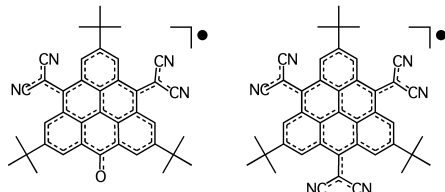
図 4. **R<sub>3</sub>TOT** の **SOMO** および **LUMO** のエネルギー準位 (ROB3LYP/6-31G//UB3LYP/6-31G)

SOMO-LUMO エネルギー差と比較・考察する。また、溶液状態における会合体の構造を明らかにするために、温度可変 ESR や UV 測定を行う。集積体の構造・物性は、結晶構造解析や固体状態における ESR や SQUID 測定、UV および IR 測定により解明する。



#### 4. 研究成果

本研究において、**Br<sub>3</sub>TOT** の合成に成功した。さらに、その OH 体の臭素原子を反応活性点として活用し、遷移金属試薬を用いたクロスカップリング反応により、芳香族置換基やアルコキシ基、電子ドナー性骨格など導入した多数の **R<sub>3</sub>TOT** の合成に成功した。置換基を変えたことにより、立体保護の効果が著しく減少しているにもかかわらず、これらの中性ラジカルはいずれも空气中・室温で扱えるほどの高い安定性を有していた。また、量子化学計算からの予測どおり、導入した置換基の種類に応じて、酸化還元電位や分子内の電子スピン密度分布を変調することに成功した。さらに、**TOT** の三個のカルボニル基の酸素を強い電子アクセプター性を持つジシアノメチレン基で置換した誘導体の設計・合成も行った（下図）。電気化学測定の結果、中心骨格と置換基双方が電子授受に関与することにより、電子受容性が向上し、酸化還元過程がさらに多段階化していた。



我々は、**TOT** が持つ高い安定性と多段階酸化還元性から、二次電池の正極活物質への活用を見出した。**(*t*-Bu)<sub>3</sub>TOT** や **Br<sub>3</sub>TOT** を正極活物質として用いた二次電池の開発を行ったところ、それぞれ 311、225 Ah/kg の放電容量を示し、従来のコバルト酸化物を用いたリチウムイオン二次電池 (150–170 Ah/kg) よりも高容量の二次電池を実現できた。特に **Br<sub>3</sub>TOT** では、100 サイクルの充放電後でも 85% の放電容量が保たれており、**TOT** 骨格自体が有する高い安定性に加え、臭素原子を含

む分子間相互作用の多次元ネットワークの構築により結晶構造が強固になり、活物質の電解液への溶出が抑制された結果であると考えられる。さらに、置換基の電子吸引性によって酸化還元電位が高電位シフトした結果、**Br<sub>3</sub>TOT** では (*t*-Bu)<sub>3</sub>TOT よりも出力電圧が大きくなっており、置換基効果によって出力電圧の制御もできることを明らかにした。本成果は、低炭素社会の実現や再生可能エネルギーの活用の必要性から、近年関心が高まっている次世代型の高性能二次電池の開発に大きく貢献できると期待される。

#### 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 28 件)

- [1] Y. Morita (8 番目), 他 7 人, “Hexamethoxyphenalenyl as a Possible Quantum Spin Simulator: An Electronically Stabilized Neutral  $\pi$  Radical with Novel Quantum Coherence Owing to Extremely High Nuclear Spin Degeneracy”, *Angew. Chem. Int. Ed.* 査読有, **52** (2013) 4795–4799 (DOI: 10.1002/anie.201301435)
- [2] S. Nishida, Y. Yamamoto, T. Takui, Y. Morita (4 番目), 他 3 人, “Organic Rechargeable Batteries with Tailored Voltage and Cycle Performance”, *ChemSusChem* 査読有, **6** (2013) 794–797 (DOI: 10.1002/cssc.201300010)
- [3] Y. Morita, T. Murata, K. Nakasuji, “Cooperation of Hydrogen-Bond and Charge-transfer Interactions in Molecular Complexes in the Solid State”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 査読有, **86** (2013) 183–197 (DOI: 10.1246/bcsj.20120241)
- [4] Y. Morita (8 番目), 他 7 人, “An Extremely Redox-active Air-stable Neutral  $\pi$ -Radical: Dicyanomethylene-substituted Triangulene with a Three-fold Symmetry”, *Chem. Eur. J.* 査読有, **18** (2012) 16272–16276 (DOI: 10.1002/chem.201203755)
- [5] T. Murata, E. Miyazaki, K. Nakasuji, Y. Morita, “Nucleobase-Functionalized 1,6-Dithiapyrene-type Electron-donors: Supramolecular Assemblies by Complementary Hydrogen-bonds and  $\pi$ -Stacks”, *Cryst. Growth Des.* 査読有, **12** (2012) 5815–5822 (DOI: 10.1021/cg301414s)
- [6] Y. Yakiyama, A. Ueda, Y. Morita, M. Kawano, “Crystal Surface Mediated Structure

- Transformation of Kinetic Framework Composed of Multi-interactive Ligand TPHAP and Co(II)", *Chem. Commun.* 査読有, **48** (2012) 10651–10653 (DOI: 10.1039/C2CC35078E)
- [7] Y. Morita (12 番目), S. Fukuzumi, 他 12 人, "Tetrathiafulvalene-fused Porphyrins via Quinoxaline Linkers: Symmetric and Asymmetric Donor-acceptor Systems", *ChemPhysChem* 査読有, **13** (2012) 3370–3382 (DOI: 10.1002/cphc.201200350)
- [8] Y. Morita (8 番目), T. Takui, 他 13 人, "A Synthetic Two-spin Quantum Bit: g-Engineered Exchange-coupled Biradical Designed for Controlled-NOT Gate Operations", *Angew. Chem. Int. Ed.* 査読有, **51** (2012) 9860–9864 (DOI: 10.1002/anie.201204489)
- [9] Y. Morita (5 人目), 他 4 人, "Modulation of Charge-transfer Complexes Assisted by Complementary Hydrogen Bonds of Nucleobases: TCNQ Complexes of a Uracil-substituted EDO-TTF", *CrystEngComm* 査読有, **14** (2012) 6881–6887 (DOI: 10.1039/C2CE25889G)
- [10] Y. Morita (7 番目), T. Takui, 他 9 人, "Pulsed Electron Spin Nutation Spectroscopy of Weakly Exchange-coupled Biradicals: A General Theoretical Approach and Determination of the Spin Dipolar Interaction", *Phys. Chem. Chem. Phys.* 査読有, **14** (2012) 9137–9148 (DOI: 10.1039/C2CP40778G)
- [11] T. Murata, K. Nakasuji, Y. Morita, "Tetrathiafulvalene-type Electron Donors Bearing Biimidazole Moieties: Multifunctional Units with Hydrogen Bonding Abilities", *Eur. J. Org. Chem.* 査読有, **22** (2012) 4123–4129 (DOI: 10.1002/ejoc.201200426)
- [12] Y. Morita (7 人目), 他 6 人, "Development of Organic Conductors with Self-assembled Architectures of Biomolecules: Synthesis and Crystal Structures of Nucleobase-functionalized Tetrathiafulvalene Derivatives", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 査読有, **85** (2012) 995–1006 (DOI: 10.1246/bcsj.20120102)
- [13] Y. Morita (7 人目), 他 6 人, "Chiral Stable Phenalenyl Radical: Synthesis, Electronic-spin Structure, and Optical Properties of [4]Helicene-structured Diazaphenalenyl", *Angew. Chem. Int. Ed.* 査読有, **51** (2012) 6691–6695 (DOI: 10.1002/anie.201202654)
- [14] T. Murata, E. Miyazaki, T. Yokoyama, K. Nakasuji, Y. Morita, "Intermolecular Hydrogen-bond Networks and Physical Properties of  $\text{BF}_4^-$  and  $\text{TCNQ}^-$  Salts of Three-fold Symmetric Tris(alkylamino)phenalenyliums", *Cryst. Growth Des.* 査読有, **12** (2012) 804–810 (DOI: 10.1021/cg201120s)
- [15] 森田 靖、西田辰介、工位武治、中筋一弘 "空気中でも安定な開殻有機分子: 電子スピン非局在型中性ラジカルの合成と動的電子スピン物性", *有機合成化学協会誌 (総合論文) J. Synth. Org. Chem. Jpn.* 査読有, **70** (2012) 50–59 (<http://dx.doi.org/10.5059/yukigoseikyo.kaishi.70.50>)
- [16] Y. Morita (1 番目), T. Takui, 他 7 人, "Organic Tailored Batteries Materials Using Stable Open-shell Molecules with Degenerate Frontier Orbitals", *Nature Mater.* 査読有, **10** (2011) 947–951 (DOI: 10.1038/nmat3142)
- [17] T. Murata, S. Maki, M. Ohmoto, E. Miyazaki, Y. Umemoto, K. Nakasuji, Y. Morita, "Redox-active Tubular Frameworks with TTF: Self-assemblies by Complementary Hydrogen-bonds and  $\pi$ -Stacks of TTF-phenyluracil", *CrystEngComm* 査読有, **13** (2011) 6880–6884 (DOI: 10.1039/C1CE05794D)
- [18] A. Ueda, K. Yoshida, S. Suzuki, K. Fukui, K. Nakasuji, Y. Morita, "Heteroatom Functionalization of Phenalenyl: Synthesis, Structures, and Properties of Hexa-substituted Phenalenyliums", *J. Phys. Org. Chem.* 査読有, **24** (2011) 952–959 (DOI: 10.1002/poc.1916)
- [19] Y. Morita (8 番目), 他 7 人, "Solution-stable Triple-helicates of Quaterimidazole: Three-dimensional Crystal Structures and Optical Resolution by Chiral-Column HPLC", *Eur. J. Inorg. Chem.* 査読有, **23** (2011) 3438–3445 (DOI: 10.1002/ejic.201100488)
- [20] Y. Morita (4 番目), 他 3 人, "Proton-transfer Salts between an EDT-TTF Derivative Having Imidazole-ring and Anilic Acids: Multi-dimensional Networks by Acid-base Hydrogen-bonds,  $\pi$ -Stacks and Chalcogen Atom Interactions", *CrystEngComm* 査読有, **13** (2011) 3689–3691 (DOI: 10.1039/C1CE05326D)
- [21] Y. Morita (8 番目), 他 7 人, "Electronic Stabilization Effect of a Spin-delocalized Neutral Radical: Synthesis of an

8-Cyano-6-oxophenalenoxyl Derivative and Quantitative Evaluation of the Electronic Spin Structure in terms of Resonance Structures”, *Chem. Asian J.* 査読有, **6** (2011) 1188–1196 (DOI: 10.1002/asia.201000793)

[22] Y. Morita, S. Suzuki, K. Sato, T. Takui, “Synthetic Organic Spin Chemistry for Structurally Well-defined Open-shell Graphene Fragments”, *Nature Chem.* 査読有, **3** (2011) 197–204 (Perspective) (DOI: 10.1038/nchem.985) 2010–2011 年大阪大学英文研究年報 (Annual Report of Osaka University -Academic Achievement-) 論文100選 受賞

[23] Y. Morita (8 番目), T. Takui, 他 8 人, “ESR and  $^1\text{H}$ -,  $^{19}\text{F}$ -ENDOR/TRIPLE Study of Fluorinated Diphenylnitroxides as Synthetic Bus Spin-qubit Radicals with Client Qubits in Solution”, *J. Phys. Chem. Lett.* 査読有, **2** (2011) 449–453 (DOI: 10.1021/jz101650z)

[24] Y. Morita (8 番目), 他 7 人, “Air-stable Curved  $\pi$ -Radical Based on Corannulene: Dynamic Electronic-spin Structure Induced by Temperature-dependent Conformational Changes”, *Aust. J. Chem.* 査読有, **63** (2010) 1627–1633 (DOI.org/10.1071/CH10280)

[25] T. Murata, Y. Yakiyama, K. Nakasuji, Y. Morita, “Supramolecular Architectures and Hydrogen-bond Directionalities of 4,4'-Bisimidazole Metal Complexes Depending on Coordination Geometries”, *Cryst. Growth Des.* 査読有, **10** (2010) 4898–4905 (DOI: 10.1021/cg100958r)

[26] Y. Morita (7 番目), 他 6 人, “Hexaazaphenylene Derivatives: One-pot Synthesis, Hydrogen-bonded Chiral Helix, and Fluorescence Properties”, *Org. Lett.* 査読有, **12** (2010) 5036–5039 (DOI: 10.1021/ol102200v)

[27] Y. Morita (12 番目), 他 12 人, “Alternating Covalent Bonding Interactions in a One-dimensional Chain of a Phenalenyl-based Singlet Biradical Molecule Having Kekulé Structures”, *J. Am. Chem. Soc.* 査読有, **132** (2010) 14421–14428 (DOI: 10.1021/ja1037287)

[28] Y. Morita (10 番目), 他 9 人, “A Bowl-shaped *ortho*-Semiquinone Radical Anion: Quantitative Evaluation of the Dynamic Behavior of Structural and Electronic Features”, *Angew. Chem. Int. Ed.* 査読有, **49** (2010) 6333–6337 (DOI: 10.1002/anie.201002626)

[学会発表] (計 144 件)

[1] 森田 靖、電子スピン非局在型中性ラジカルの新展開、東北大学卓越大学院研究会「金属錯体の固体物性最前線-金属錯体と固体物性物理と生物物性の連携新領域を目指して-」、2013.2.4-6, 東北大学

[2] 森田 靖、レアメタルフリーの高性能分子スピン電池の開発、大阪スマートエネルギー・ビジネスシーズコンペ受賞者発表会、2013.2.1, 東京ビッグサイト

[3] 森田 靖、開殻グラフェンフラグメント：空気中でも安定な有機中性ラジカルの設計・合成と蓄電デバイスへの展開、炭素材料学会セミナー、2013.1.18, 東京 総評会館

[4] 森田 靖、空気中でも安定な有機中性ラジカルの新展開：基礎物性と二次電池への応用、京都大学大学院工学研究科 分子工学コロキウム、2012.12.18, 京都大学

[5] 森田 靖、電子スピン非局在型の安定な有機中性ラジカルの新展開：基礎物性とコバルトフリー高性能 Li イオン二次電池への挑戦、九州大学大学院薬学研究院機能分子合成化学セミナー、2012.11.30, 九州大学

[6] Y. Morita, Molecular Spin Battery: Tailor-made Rechargeable Battery Based on Air-stable Neutral Radicals, International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2012), 2012.10.7-11, Orlando, Florida (米国)

[7] 森田 靖、電子スピン非局在型の安定な有機中性ラジカルを活物質に用いたコバルトフリー高性能 Li イオン二次電池、北海道大学元素戦略教育研究センター講演会、2012.5.25, 北海道大学

[8] 森田 靖、空気中でも安定な有機中性ラジカルの最前線：基礎物性と分子スピンバッテリーへの展開、フロンティア機能物質創製センターシンポジウム：機能性物質の最前線 - 物質科学の新展開を目指して-、2011.12.18, 財団法人西播地域地場産業振興センター

[9] 森田 靖、電子スピンのマニピュレーション： $\pi$ 電子系有機分子を基盤にした分子技術、RN シンポジウム 2011、2011.12.10, 名古屋大学

[10] 森田 靖、 $\pi$ 電子系有機分子の合成を基盤にした電子スピンのマニピュレーション、第 99 回有機合成シンポジウム 社団法人 有機合成化学協会 2010 年度 DIC 機能性材料賞受賞講演、2011.6.15-16, 慶應義塾大学薬学部

[11] 森田 靖、Synthetic Organic-spin Chemistry：空気中でも安定な炭素中心型中性ラジカルの新展開、日本化学会中国四国支部岡山地区化学講演会、2010.1.31, 岡山大学 津島キャンパス

[12] Y. Morita, Chiral Neutral Radicals with An Extremely Spin-delocalized Nature, “Reactive

Intermediates and Unusual Molecules” at 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, 2010.12.15-20, Honolulu 米国

[13] Y. Morita, Solution-stability and Optical Resolution of Triply-helical Metal Complexes of Quaterimidazole, “Designed Pi Systems-Synthesis, Properties, Theory and Function” at 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, 2010.12.15-20, Honolulu 米国

[14] 森田 靖, Air-stable pi-Extended Neutral Radical Chemistry: Molecular Design and Dynamic Electronic-spin Nature、三菱化学 科学技術研究センターセミナー、2010.11.8、横浜市

[15] 森田 靖、「synthetic organic-spin chemistry」: 空気中でも安定な炭素中心型中性ラジカルの新展開、京大グローバル COE 「第七回有機元素化学セミナー」、2010.11.1、京都大学 宇治キャンパス

[16] 森田 靖、Synthetic Organic-spin Chemistry: 空気中でも安定な炭素中心型中性ラジカルの新展開、日本分析工業 JAI セミナー、2010.10.22、梅田スカイビル

[17] Y. Morita, Synthetic Organic-spin Chemistry: Molecular Design and Dynamic Electronic-spin Nature of Air-stable pi-Extended Neutral Radicals, POSTECH WCU AMS Seminar, 2010.10.13, POSTECH

〔図書〕(計 7 件)

[1] 森田 靖、化学同人、「有機中性ラジカルの  $\pi$  電子科学」CSJ カレントレビュー12 未来材料を創出する  $\pi$  電子系の科学 Part II 研究最前線 11 章、日本化学会 編、2013、pp. 120-126

[2] 森田 靖、日本化学会 学術研究活性化委員会、「安定開殻有機分子を活用した次世代型二次電池」第二次先端ウオッチング調査：融合領域の創成 分子エレクトロニクスから分子スピントロニクスへの展望、2013、pp. 21-24

[3] Y. Morita (6 番目), T. Takui, 他 8 人, Springer-Verlag, Dordrecht, “Novel Applications of ESR/EPR: Quantum Computing/Quantum Information Processing” In *EPR of Free Radicals in Solids II, Progress in Theoretical Chemistry and Physics Volume 25*, edited by A. Lund, M. Shiotani, 2013, pp. 163-204

[4] Y. Morita, *Angew. Chem. Int. Ed.* “Author Profile for Angewandte Chemie (published by Wiley-VCH), 2013, pp. 4298

[5] 西田辰介・森田 靖・佐藤和信・工位武治、化学同人、「有機分子スピンバッテリーの開発 — 縮重フロンティア分子軌道を利用した

二次電池」化学 Vol.67 No.9, 2012, pp. 37-43

[6] Y. Morita, A. Ueda, John Wiley&Sons Ltd., New Jersey, “Curved  $\pi$ -Conjugated Stable Open-shell Systems Possessing Three-dimensional Molecular/Electronic-spin Structures” Chapter 4 In *Fragments of Fullerenes and Carbon Nanotubes: Designed Synthesis, Unusual Reactions, and Coordination Chemistry*, edited by M. A. Petrukhina, L. T. Scott, 2012, pp. 95-134

[7] Y. Morita, S. Nishida, John Wiley&Sons Ltd., Chichester, “Phenalenyls, Cyclopentadienyls, and Other Carbon-Centered Radicals” Chapter 3 In *Stable Radicals: Fundamentals and Applied Aspects of Odd-Electron Compounds*, edited by Robin Hicks, 2010, pp. 81-145

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 3 件)

[1] 名称: 有機半導体を用いた赤外線センサ  
発明者: 森田 靖、村田剛志、横山正明、辻 良太郎、大塚岳夫、宮里涼子

権利者: 同上

種類: 特許

番号: 特願 2012-035378

出願日: 平成 24 年 2 月 21 日

国内外の別: 国内

[2] 名称: 有機分子スピンバッテリー

発明者: 工位武治、佐藤和信、森田 靖

権利者: 同上

種類: 特許

番号: 特願 2011-204821

出願日: 平成 23 年 9 月 20 日

国内外の別: 国内

[3] 名称: 有機分子スピンバッテリー

発明者: 工位武治、佐藤和信、森田 靖

権利者: 同上

種類: 特許

番号: PCT/JP2012/74000

出願日: 平成 23 年 9 月 20 日

国内外の別: 国外

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/lab/nakasuji/morita/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

森田 靖 (MORITA YASUSHI)

大阪大学・大学院理学研究科・准教授

研究者番号: 70230133