

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域
「量子情報処理システムの実現を目指した新技術の創出」

研究課題
「分子スピン量子コンピュータ」

研究終了報告書

研究期間 平成17年10月～平成23年3月

研究代表者：北川 勝浩
(大阪大学大学院基礎工学研究科、教授)

§1 研究実施の概要

分子の核スピンを量子ビットとして、分子の数や計算ステップ数などが指数爆発を起こさない真の量子計算の実現を目指して、初期化、量子演算、および、それらを連続して行う研究を行った。その結果、ナフタレン結晶にドーブしたペンタセン分子の光励起三重項状態電子スピンをを用いた動的核偏極法 (DNP) (以下、光励起三重項 DNP) によって 28.4% の偏極率を達成した。また、短時間に高偏極を得ることを目的として、p-テルフェニル結晶にドーブしたペンタセン分子の光励起三重項 DNP を、ホスト結晶の重水素化率を変化させて行い、最適な重水素化率が存在することを見出し、偏極率 18% を最短 40 秒で達成した。さらに、重水素デカップリングを行うことにより、プロトン間のスピン拡散を 2 倍に高速化した。低磁場 (0.4T) での DNP による物理的初期化と高磁場 (11.7T) での NMR による量子演算を連続して行うために、フィールドサイクリングシステムを開発した。また、物理的初期化と量子演算を連続して行うための分子系として、重水素化したナフタレンに、DNP 用のペンタセンと量子演算用の ^{13}C ラベルしたナフタレンを共ドーブした結晶を作製した。さらに、フッ素核スピン 1 つ (または 2 つ) を量子ビットとする (ジ) フルオロナフタレン分子をペンタセンとともにナフタレン結晶に共ドーブして、光励起三重項 DNP によってホスト結晶を高偏極化した後、零磁場近傍での異核間スピン拡散を利用してフッ素核スピン量子ビットを高偏極化した。また、不要なダイポール相互作用を消去しながら量子演算を行うために、Lee-Goldburg 照射を利用した量子演算を開発し、デコヒーレンス時間が長くなることを示した。さらに、量子演算用の高度なパルス照射が可能な FPGA や任意波形発生器 (AWG) をベースとしたフレキシブルな NMR 分光計を開発した。

分子の電子スピンを量子ビットとして初期化して量子演算を行うために極低温下でパルス電子スピン多重共鳴を行う装置を開発した。また、共振器によるパルス波形の歪を補償して、共振器内のスピンに所望の高周波磁場パルス波形を精密に照射する方法を開発した。さらに、単一核スピンの測定を目的として、140 倍の高利得スピン増幅器を実現した。

本 CREST の課題実施期間の前半期では、既存のパルス高周波マイクロ波技術を高度化し、1.5 K 以下の低温で長時間動作する、分子スピン量子コンピュータの要素技術を確立した (Q バンドマイクロ波 Coherent-Dual (CD-ELDOR) パルス技術)。分子スピン量子ビット (qubit) 系の物質開発では、前半期で実現した CD-ELDOR 技術で制御できる程度に弱い交換相互作用系 2 及び 3 電子スピンをもつ新規な開殻系安定有機分子 (biradicals, triradicals) の一般的な分子設計の指針 (g -tensor engineering 及び pseudo g -tensor engineering) を確立し、デコヒーレンス時間の長い、分子スピン qubit 系 (2 桁の分子種) を合成した。これらの分子系のうち、qubit としての条件を満足していることを証明するために、これらの安定な磁氣的希釈単結晶について、X 線構造解析・スピン物性の全解析を完成し、synthetic matter spin-qubits の概念を確立した。この過程で、電子スピン双極子相互作用と弱い交換相互作用の実験的分離抽出を初めて行うことに成功したので、2 電子 qubit 系の擬初期化のためのパルス系列プロトコル、基本論理ゲート構築に特化した量子コンピュータ/量子情報処理技術の初歩的実験 (CNOT など) を完成した。本 CREST の課題において、分子スピン系の電子スピン qubit を用いた CNOT ゲートを初めて実現した。また、多電子 matter qubit 系の合成戦略では、計画の前倒しを図り、電子スピン qubit の利点 (scalability) を活かして、Lloyd 型の 1 次元周期構造電子スピン系プロトタイプ合成に初めて成功した。これにより、matter qubit としての scalability の課題に対して、有力な solution を示した。さらに、これらの拡張系の合成法を開拓した。Qubit の scalability を目指す、この合成戦略では、DNA 2 重螺旋構造内の塩基間に働く強固な相補的水素結合にヒントを得て、3 重螺旋構造を形成する、金属イオン helicates (配位子が巻くヘリックス構造の中心位置に開殻金属イオンを内包する錯体) を利用して、電子スピン qubit を配列させるアプローチを考案した。スピン 2-qubit 系では、核スピン qubit と電子スピン qubit 間の擬似 entanglement を利用して「電子スピンのスピノール」を実験的に初めて直接検出した。さらに、現在のマイクロ波パルス技術で

取り扱える電子スピン双極子相互作用をもつ3電子スピン qubit 系を新たに設計・合成した。最終年度の課題の一つとして、現在のパルス電子磁気共鳴実験の時間分解能に耐えられる長さのデコヒーレンス時間をもつ、磁氣的希釈単結晶系を作成することができた。

高精度の基本的量子計算素子の実現を阻む不可避な量子雑音の性質を解明することを目的とし、量子計算、量子測定の精度の限界を制御に使われる相互作用が従う保存法則だけから明らかにするという画期的な研究方法を確立して、ウイグナー・荒木・柳瀬の定理の一般化公式、任意の量子ゲートの誤差公式、量子雑音プロセス推定のフィッシャー情報量の公式を導出し、また、これらの知見を応用して量子アルゴリズムの研究を行い、量子アルゴリズムの設計方法全般を拡張 Clifford 群の観点から再構築した。

また、分子スピン以外にも、巨視的な人工スピンあるいは少数準位原子とも言うべき超伝導磁束量子ビットを中心に高精度な量子状態制御および読み出しを実現することを目指してきた。散逸の小さい超伝導量子回路では、量子ビットだけでなく、線形あるいは非線形の共振器また伝送線路も容易に実現される。巨大な双極子モーメントを持つ人工原子とこれらの電磁場モードとの組み合わせにより、マイクロ波帯域の量子光学実験を基板上で実現することを目指してきた。超伝導量子ビットを2つあるいは3つのエネルギー準位を持つ人工原子として用い、これを超伝導共振回路や超伝導伝送線路と強く結合させた場合に起こる量子光学的効果の実験を行い、成果を得た。このような技術は、量子演算回路における量子情報バスなどに適用することが期待される。

§ 2. 研究構想

(1) 当初の研究構想

量子計算が古典計算に対する真の優位性を発揮するために、計算前の初期化や計算後の読み出しも含めて指数的な資源を必要としない、真の量子計算の実現を目指した。従来、核磁気共鳴(NMR)を用いた量子計算では、熱エネルギーが量子エネルギーをはるかに上回る、従ってエントロピーが最大に近い熱平衡状態を物理的な初期状態として使いながら、エントロピー零の純粋状態を初期状態とする量子計算結果を読み出すために、疑似初期化という巧妙な方法が使われてきた。しかし、 n 量子ビットの 2^n 個の基底状態の(ほぼ完全な)混合状態アンサンブルに占める1つ(n に無関係な定数個)の状態のサブアンサンブルの割合は $1/2^n$ であり指数的に小さいため、いかに巧妙に疑似初期化を行っても、読み出しの信号強度は n に対して指数的に減衰し、それを補うために指数的な計算資源(ステップ数または量子計算機の台数)が必要となり、古典計算に対する優位性を失ってしまう。

そこで、本研究では、疑似初期化ではなく、多項式資源しか使わない真の初期化を目標とした。そのための戦略として、まず何らかの方法で、量子ビット系のエントロピーを下げて、物理的な初期状態に含まれる状態の数を減らし、必要ならばさらにその後、データ圧縮を行って初期状態の違いを少数の量子ビットに圧縮し、残りの量子ビットからなる部分系(サブシステム)を初期化された量子レジスタとして用いるというシナリオを描いた。

まず、分子の核スピンを量子ビットとする場合、量子エネルギーが非常に小さいため、極低温でも十分な初期化が期待できない。そこで、ある種の分子(ペンタセン)の三重項状態の電子が自発的に高偏極していることを利用して、動的核偏極(DNP)によってその偏極を核スピン量子ビットに移すことを計画した。Shor のアルゴリズムで 15 を素因数分解するには 6~7量子ビットが必要であるが、そのうち少なくとも3量子ビットは初期化されている必要がある。そこで、次の最終目標を立てた。ペンタセンで可能な最大の偏極率 70%を実現し、それを 8 量子ビットの分子に移すと、典型的に 7量子ビットが $|0\rangle$ 、1量子ビットが $|1\rangle$ の状態が得られる。これを物理的な初期状態として、データ圧縮アルゴリズムを実行すると、初期状態の違いは 3 量子ビットに圧縮されて、残りの 5 量子ビットが

|00000>に初期化される。

もう一つのシナリオとして、核スピンよりも初期化が容易な電子スピンを量子ビットとして用いることを考えた。熱平衡状態の偏極率は、スピン共鳴周波数(磁場に比例)と温度の比で決まり、電子スピンの場合は極低温である程度強い磁場を印加すれば、ほぼ完全に初期化することも可能である。そこで、量子ビットとして使える電子スピンを複数含んだ安定なラジカル分子を新規に設計して合成するとともに、それらの電子スピんで量子演算を行うための電子スピン多重共鳴装置を開発することを計画した。電子スピン2量子ビット分子の合成とそれによる量子演算を目標とし、さらに多量子ビット化を目指すこととした。さらに、大規模な量子計算に必須な誤り耐性に関する指針を得ることを目的として、量子演算の限界に関する理論的研究を行うことを計画した。

分子の電子スピン量子ビットについて研究開始時の3大構想は、2-1 分子スピン系で電子スピンの2-及び3-qubitを分子設計・合成し、基本的な量子ゲート操作の実行を可能とする、デコヒーレンス時間の長いアンサンブル分子スピン電子スピン qubit 系を物質開発すること (synthetic electron spin-qubit の概念確立)、2-2 分子スピン qubit 系の電子スピン間に位相制御を実行できる QC spectroscopy (Coherent Dual Electron-Electron Double Resonance spectrometer:CD-ELDOR) の装置及び技術開発を行うこと、単一 electron spin-qubit 位相制御及び2-electron qubit の CNOT ゲート操作の実現、2-3 最終年度には synthetic matter spin-qubit の利点を活かした scalable な電子スピン系を設計・合成することであった。2-1 は、新規な物質設計・開発であるために、time-consuming な作業を要するので、初年度から人材を投入して、中間評価の時期までに具体的な分子スピン系を得、最終年度前半期に基本ゲートの確立実験を成功させる。2-2 では、2年度内に1号機を完成させ、分子スピン qubit の位相を制御できる要素技術を確立し、稼働させる。2年目以降は、長時間の測定に即応するために、新型のクライオスタット2号機を設計し、長時間稼働体制をルーチン化する。2-3の、分子スピンを活用する電子スピン qubit 戦略では、qubit の scalability がメリットの一つであるが、分子振動など、qubit にとってはいわば「環境」の役割を果たす因子のデコヒーレンスなどの影響をいかに低減するかは解決すべき重要な課題である。理論的には早くから、1次元周期系の spin qubit array が、有望な matter spin-qubit として Lloyd により提唱されてきたが、materials challenge はこれまで試みられたことはなかった。そこで、DNA バックボーンを形成する2重螺旋構造を活用するなどして g-tensor engineering によってアドレス可能な電子スピン量子ビットをスケラブルに増やす可能性を探る。

フォールトトレラント量子計算についての研究構想は、基礎研究と応用研究に分かれ、基礎研究では、(1) 不確定性原理と保存則に由来する量子雑音の研究と、(2) 量子計算素子の誤り確率に関する一般理論の展開を目標とし、応用研究では、(1)デコヒーレンスを抑圧する量子アルゴリズムの研究と、(2) 量子雑音理論の量子暗号への応用を目標とした。

(2)新たに追加・修正など変更した研究構想

分子の核スピンの初期化については、2つの点で当初計画を変更した。一つは、ペンタセンの光励起三重項状態を用いた DNP による偏極率が、当初目標とした理論限界 70%に到達せず、また、高偏極化に長時間の実験が必要であったため、到達偏極率の高さよりも、高速化に重点を置くように修正した。もう一つは、8量子ビットの分子をペンタセンと共にホスト結晶にドープすることが非常に困難であることが分かったため、多量子ビット分子の初期化はドープではなく近接 DNP 等別の方法を考案することとして、実験の目標を共ドープ可能な少数量子ビット分子の初期化に修正した。

一方、新たに2つの目標を追加した。誤り耐性量子計算のための超高精度量子演算を目指して、スピン量子ビットに印加される高周波・マイクロ波磁場パルスの精度を上げるために、共振器の過渡現象等を補償する方法を研究する。将来的にアンサンブル系から単

一量子系への移行を可能とするために、スピン量子ビットの最大の欠点とされる検出感度の低さを克服する方法を研究する。

スケーラブルな分子スピン量子ビット系の研究 (2-3) は、当初に構想していた DNA バックボーンを形成する 2 重螺旋構造からヒントを得て、3 重螺旋対称性を取り入れた g-tensor engineering 設計を考案し、最終年度を待たずに中間評価までに、Lloyd モデルの電子スピン qubit 版の基本単位を合成し、addressable qubit が分子系で実現していることを、構造面からは X 線構造解析によって、スピン物性の面からは電子磁気共鳴法によって、それぞれ証明した。3 重螺旋構造の対称性を利用することは初期の構想では確立していなかったが、本 CREST では、相補的水素による強固な DNA の 2 重螺旋構造の対称性からヒントを得て、3 重螺旋対称構造をもつ、開殻系金属イオン helicates を新たに設計・合成し、scalable matter qubit として有力な Lloyd モデル系 (磁氣的希釈単結晶) を物質系として初めて実現した。

2-2 の項で述べる CD-ELDOR 装置は、当初の設計仕様から時間分解能を大幅に改善するために、40W の外部付け Q バンド TWT マイクロ波増幅器を導入して、100 倍の高出力を得た。

フォールトトレラント量子計算の研究では、当初計画の新たな量子誤り訂正等のデコヒーレンス抑圧法の研究のアルゴリズム的基礎を明らかにするために、NTT の河野泰人をメンバーに加えて、研究内容に量子アルゴリズムの効率化に関する基礎研究を加えた。

中間評価を受けて、超伝導量子ビットに関する下記の研究構想を加えた。

超伝導磁束量子ビット制御の高精度化：多チャンネル任意波形発生器とミキサーを利用したサイドバンド変調方式によるマイクロ波パルスシーケンサーを用いて、NMR で知られているような種々のパルスシーケンスによる磁束量子ビットの制御を高精度に行う。制御の忠実度をトモグラフィの手法により定量的に評価する。1 ビットおよび結合した 2 ビットに関して実験を行う。

超伝導磁束量子ビットのデコヒーレンス要因の究明：上記制御手法を量子ビットのデコヒーレンス要因の追究に適用する。複数量子ビットのデコヒーレンスにおけるノイズの相関などを調べる。また周辺回路環境や材料に対する依存性についても評価する。特に回路中あるいは回路上に意図的に配置した電子スピンの影響を検討する。

超伝導非線形共振回路を用いた量子ビットの読み出し：駆動された非線形共振回路における分岐現象を利用した量子ビットの単一事象読み出しを高い忠実度で実現する。またパラメトリック発振を用いた新しい方式も試みる。パラメトリック増幅器としての量子雑音の定量的評価も行う。

超伝導量子ビットと超伝導線形共振回路および伝送線路との結合：人工スピンとしての超伝導量子ビットを用いたマイクロ波 (X バンド: 10GHz 周辺) 量子光学の可能性を広げる。非線形共振回路により発生されるスクイーズド光との相互作用も検討する。

小さいモード体積を持つ超伝導共振回路のマイクロ波光子場と固体あるいは分子中の電子スピンの集団とのコヒーレントな相互作用の可能性を検討する。

§ 3 研究実施体制

(1)「量子計算」グループ

① 研究者名

氏名	所属	役職	参加時期
北川 勝浩	大阪大学大学院基礎工学研究科	教授	H17.10～H23.3
武田 和行	大阪大学大学院基礎工学研究科	助教	H17.10～H19.8
藤原 彰夫	大阪大学大学院基礎工学研究科	教授	H17.10～H23.3
服部 睦代	大阪大学大学院基礎工学研究科	CREST チーム事務員	H17.10～H23.3
長嶋 健介	大阪大学大学院基礎工学研究科	D 退学	H17.10～H19.3
香川 晃徳	大阪大学大学院基礎工学研究科	D 研究指導認定退学	H17.10～H19.9
同	大阪大学大学院基礎工学研究科	CREST 研究員	H19.10～H20.9
同	大阪大学大学院基礎工学研究科	助教	H20.10～H23.3
Robabeh Rahimi Darabad	大阪大学大学院基礎工学研究科	D 卒業	H17.10～H18.3
齋藤 暁	大阪大学大学院基礎工学研究科	D 卒業	H17.10～H19.3
同	大阪大学大学院基礎工学研究科	研究員	H19.4～H20.3
犬飼 宗弘	大阪大学大学院基礎工学研究科	D 研究指導認定退学	H17.10～H20.9
Peng Weng Kung	大阪大学大学院基礎工学研究科	D 卒業	H17.10～H20.7
田邊 広光	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H17.10～H18.3
山中 祥吾	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H17.10～H18.3
根来 誠	大阪大学大学院基礎工学研究科	D3	H17.10～H23.3
坂東 明成	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H17.10～H19.3
荒津 大輔	大阪大学大学院基礎工学研究科	D3	H19.4～H23.3
大谷 博一	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H20.4～H21.3
小椋 健志	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H20.4～H21.3
佐藤 哲也	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H20.4～H21.3
橋本 侑之助	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H20.4～H21.3
岸田 拓郎	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H20.4～H22.3
立石 健一郎	大阪大学大学院基礎工学研究科	D1	H20.4～H23.3
田淵 豊	大阪大学大学院基礎工学研究科	D2	H20.4～H23.3
山科 イサク	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H20.4～H22.3
結城 啓介	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H20.4～H22.3
梅本 卓志	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H21.4～H23.3
臼井 尚俊	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H21.4～H23.3
金生 卓也	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H21.4～H23.3
櫻井 祥樹	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H21.4～H23.3
灰原 佑紀	大阪大学大学院基礎工学研究科	M 卒業	H21.4～H23.3
YAP YUNG SZEN	大阪大学大学院基礎工学研究科	D2	H21.10～H23.3

② 研究項目

- (1) 分子の核スピンによる真の量子計算
- (2) 電子スピン多重共鳴量子演算装置開発

(2)「分子電子スピン」グループ(研究機関別)

①研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
工位 武治	大阪市立大学大学院理学研究科	特任教授	H17.10～H23.3
佐藤 和信	大阪市立大学大学院理学研究科	教授	H17.10～H23.3
岡田 恵次	大阪市立大学大学院理学研究科	教授	H17.10～H23.3
塩見 大輔	大阪市立大学大学院理学研究科	准教授	H17.10～H23.3
豊田 和男	大阪市立大学大学院理学研究科	助教	H17.10～H19.3
	同上	講師	H19.4～H23.3
森田 靖	大阪大学大学院理学研究科	准教授	H17.10～H23.3
西田 辰介	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員	H17.10～H20.3
同	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員(委託費雇用)	H20.4～H23.3
森 展之	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員	H17.10～H19.3
同	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員(委託費雇用)	H19.4～H20.3
中澤 重顕	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員(委託費雇用)	H19.4～H23.3
伊瀬 智章	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員	H17.11～H18.3
同	大阪市立大学大学院理学研究科	CREST 研究員	H18.4～H20.3
同	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員(委託費雇用)	H20.4～H22.3
杉崎 研司	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員	H17.11～H.20.3
同	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員(委託費雇用)	H20.4～H23.3
神崎 祐貴	大阪市立大学大学院理学研究科	研究生	H20.4～H22.3
同	大阪市立大学大学院理学研究科	研究員	H22.4～H23.3
古藤 輝明	大阪市立大学大学院理学研究科	D 卒業	H18.7～H20.3
沢井 隆利	大阪市立大学大学院理学研究科	D 卒業	H18.7～H20.3
吉野 共広	大阪市立大学大学院理学研究科	D3	H18.7～H23.3
同	大阪市立大学大学院理学研究科	JSTRA	H21.4～H23.3
文部 一希	大阪市立大学大学院理学研究科	D1	H20.4～H23.3
同		研究補佐員(委託費雇用)	H22.4～H23.3
野崎 幹人	大阪市立大学大学院理学研究科	D3	H21.12～H23.3
同		研究補佐員(委託費雇用)	H22.4～H23.3
田中 彩香	大阪市立大学大学院理学研究科	M1	H22.4～H23.3
Robabeh Rahimi Darabad	大阪市立大学大学院理学研究科	博士研究員	H22.4～H22.10

②研究項目

分子の電子スピンを活用した量子コンピュータ

(3)「フォールトトレラント量子計算理論」グループ(研究機関別)

①研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
小澤 正直	東北大学大学院情報科学研究科	教授	H17.10～H20.3
	名古屋大学大学院情報科学研究科	教授	H20.4～H23.3
河野 泰人	NTT コミュニケーション科学基礎研究所	主任研究員	H18.7～H23.3
唐澤 時代	東北大学大学院情報科学研究科	D 卒業	H17.10～H19.3
津田 崇	名古屋大学大学院情報科学研究科	D1	H21.4～H23.3

同	名古屋大学大学院情報科学研究科	JSTRA	H21.4～H23.3
高橋 雅也	名古屋大学大学院情報科学研究科	M1	H21.4～H23.3

②研究項目

- (1) 不確定性原理と保存則に由来する量子雑音の研究
- (2) 量子計算素子の誤り確率に関する一般理論の展開
- (3) 量子アルゴリズムに関する応用研究
- (4) 量子雑音理論の量子暗号への応用

(4)「超伝導量子回路」グループ(研究機関別)

①研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
中村 泰信	理化学研究所基幹研究所	客員研究員	H21.4～H23.3
山本 剛	理化学研究所基幹研究所	客員研究員	H21.4～H23.3
蔡 兆申	理化学研究所基幹研究所	グループリーダー	H21.4～H23.3
猪股 邦弘	理化学研究所基幹研究所	研究員	H21.4～H23.3
吉原 文樹	理化学研究所基幹研究所	研究員	H21.4～H23.3
宮崎 利行	理化学研究所基幹研究所	研究員	H21.4～H23.3
Yuri Pashkin	理化学研究所基幹研究所	研究員	H21.4～H23.3
Oleg Astafiev	理化学研究所基幹研究所	研究員	H21.4～H23.3
Abdulfarrukh Abdumalikov	理化学研究所基幹研究所	研究員	H21.4～H22.9
Pierre-Marie Billangeon	理化学研究所基幹研究所	研究員	H22.4～H23.3

②研究項目

- (1) 超伝導量子ビット回路および共振回路の量子制御
- (2) 超伝導非線形共振回路のダイナミクスおよび量子ビット読み出しへの適用
- (3) 超伝導量子演算回路方式の検討
- (4) 超伝導量子ビット制御および読み出しの高精度化とデコヒーレンス要因の究明
- (5) 超伝導量子ビットと共振回路および伝送線路との結合

§ 4 研究実施内容及び成果

4. 1 分子の核スピンによる真の量子計算と電子スピン多重共鳴量子演算装置開発 (大阪大学北川グループ)

(1)研究実施内容及び成果

1-1 光励起三重項電子スピンを用いた動的核偏極による物理的初期化

分子の核スピン量子ビットを物理的に初期化することを目的として、ペンタセン分子の光励起三重項状態の高偏極電子スピンを用いた動的核偏極(DNP)法の実験的研究を行った。ナフタレンや p-テルフェニルの結晶にペンタセン分子をドーピングして、色素レーザー(590nm)で励起して高偏極した三重項状態の電子スピンを生成し、低磁場(0.4T)下で電子スピン共鳴(ESR)周波数のマイクロ波(Ku帯~12GHz)を照射しながら磁場掃引を行い、ある種の Hartmann-Hahn 条件(静磁場中で、回転座標系における電子スピンの共鳴マイクロ波による回転であるラビ振動と実験室座標系における核スピンのラーマー歳差運動の周波数が一致)を満たして、Integrated Cross-Polarization(ICP)(歴史的に Integrated Solid Effect(ISE)とも称される)によってプロトンスピンに偏極を移す光照射 ICP シーケンスを繰り返して、宿主結晶のプロトンを高偏極化した。

- a) ナフタレン結晶にドーピングしたペンタセンで最終的にプロトン核スピンを電子スピンの偏極率で決まる限界の 70%程度まで偏極させることを目標として実験的研究を行った。また、宿主結晶として室温で安定な p-テルフェニルを用いた実験も行った。

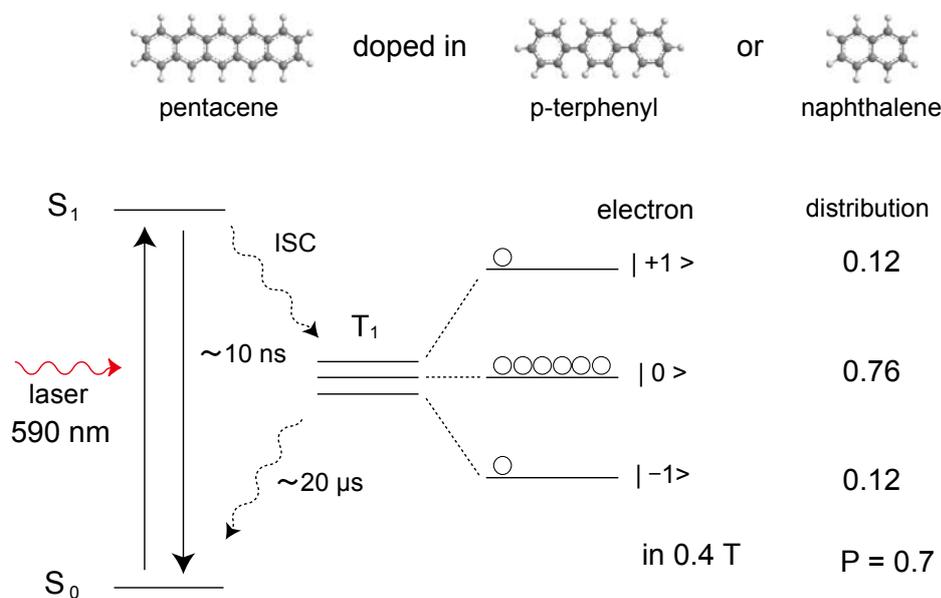


図1-1-1. ペンタセンのエネルギー準位

- b) DNP 用のマイクロ波共振器をループギャップ共振器やスロットドチューブ共振器からより機械的に強固な円筒型空洞共振器に変更し、実験パラメータの見直しを行なうなど、実験系について考える改良をほぼ全て行った。(後の図1-3-2を参照)
- c) 結晶については、ゾーンメルト法で宿主結晶材料の純度を上げてから、ブリッジマン法で成長し、成長条件を様々に変えて多くの試料を作製した。
- d) これまでに到達偏極率の最大値としては、ナフタレン結晶宿主ではペンタセン濃度 0.015mol%で偏極率 28.4%を 2400 秒(40 分)で達成した。(図1-1-3 左) p-テルフェニル結晶宿主ではペンタセン濃度 0.05mol%で偏極率 18.8%を 720 秒(12 分)

で達成した。(図1-1-3 右)

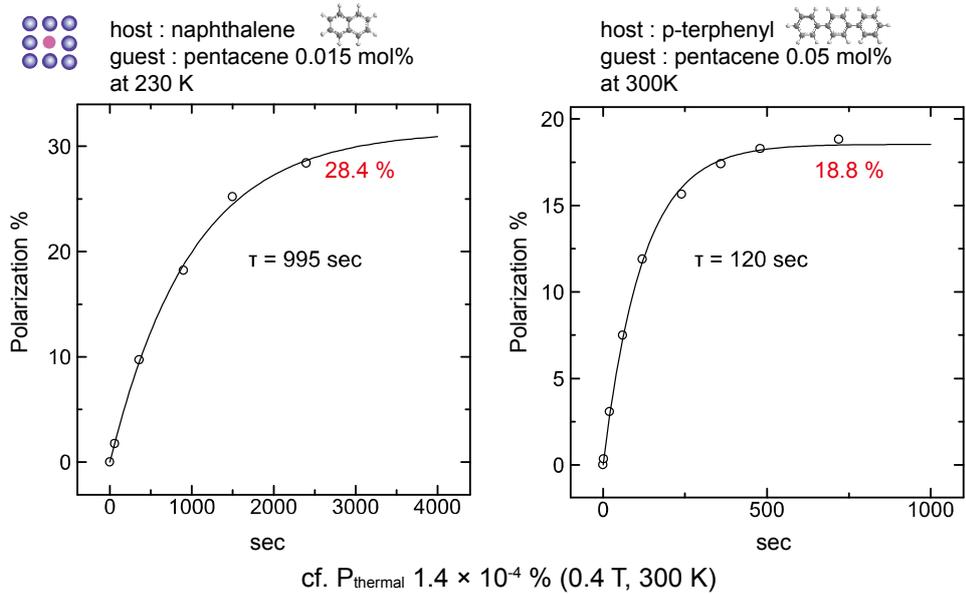


図1-1-2. 左ナフタレン結晶ホスト、右 p-テルフェニル結晶ホスト

- e) 従来10時間かかっていた実験時間の短縮を目的として、偏極ビルドアップの高速化の研究を行った。ホスト結晶の重水素化によって偏極すべきプロトンスピンの数が減り、偏極の高速化が期待される。一方、プロトン間の距離が大きくなることにより、スピン拡散によって高偏極が広がる速度が遅くなる逆の効果も想定される。そこで、室温で安定な p-テルフェニルをホスト結晶として、ホスト分子の重水素化によってプロトン濃度を様々に変えて、高偏極化実験と光照射時のスピン-格子緩和時間などの系統的測定を行い、ホスト結晶のプロトン濃度に最適値が存在することを実験的に明らかにした。(図1-1-3 左)

[A. Kagawa, *et al.*, J. Magn. Reson. 197, 9-13 (2009)]

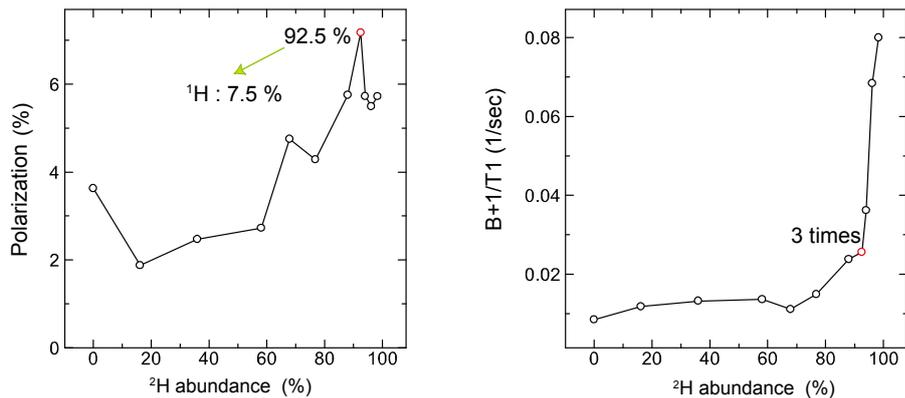


図1-1-3. 到達偏極率(左)とビルドアップレート(右)の重水素化率依存性

- f) 重水素化率の高い(プロトン濃度の低い)結晶では、プロトン間の距離が大きいうえに、その間に存在する大量の重水素がプロトン間のスピン拡散を邪魔していると考えられる。そこで、重水素に高周波照射を行ってデカップルする実験を行い、スピン拡散が2倍に改善されることを明らかにした。これによって、偏極ビルドアップのさらなる高速化が期待される。実際に、40秒で18%の偏極率が得られている。(図1-1-4)

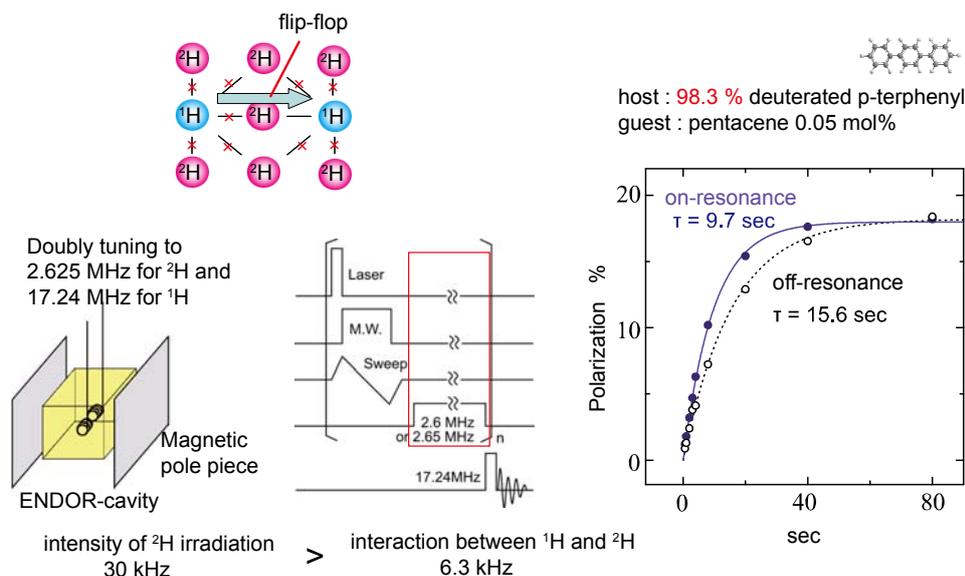


図1-1-4. 重水素デカップリングによるプロトン間スピン拡散の高速化

- g) ナフタレンホストで到達偏極率が当初目標の 70%に達しない原因として現時点で最も有力なのは、成長したホスト結晶のスピン-格子緩和時間 T_1 が通常よりもかなり短いことである。 T_1 が短い原因は未解明であるが、一つの仮説として、ドーブされたペンタセン分子がホスト結晶に均一に分布しておらず、マイクロクラスターを形成していることが考えられる。その場合、ペンタセンのマイクロクラスターとホスト結晶の界面で T_1 が短くなる。さらに、レーザー光照射時にはペンタセンのマイクロクラスター近傍が局所的に高温化して T_1 がさらに短くなる可能性がある。
- h) サンプル品質以外に到達偏極率を下げている原因として考えられるのは、光照射時のサンプル温度の上昇くらいしかなく、冷却方法を工夫して、実験を行う予定である。

1-2 固体 NMR による量子演算

物理的初期化によって実現された高偏極をそのまま量子演算に生かすには、量子演算も固体で行なうのが最も効率的である。そのため、量子演算用の分子も単結晶にドーブされていることを想定して、固体 NMR による量子演算の研究を行った。溶液に比べて、核スピン間のダイポール相互作用が強く、線幅も広がっているため、下記の研究を行った。

- a) 強照射化: マイクロコイルによる RF 電力から磁場への高効率変換
 マイクロコイルによる強照射化の効果を実験的に確認し、多 qubit 演算に必要な多重共鳴マイクロプローブを作製して、強照射化を実現した。
- b) ダイポールデカップリング: Lee-Goldberg 照射の量子演算への応用
 固体分子で、Lee-Goldberg(LG)照射によって、プロトンスピン間のダイポール相互作用を全てデカップルしながら 1 量子ビットの任意回転と 2 量子ビット間の iSWAP 量子演算を行い、LG 照射を用いない場合よりもデコヒーレンス時間が延びることを実証した。(図1-2-1、図1-2-2)

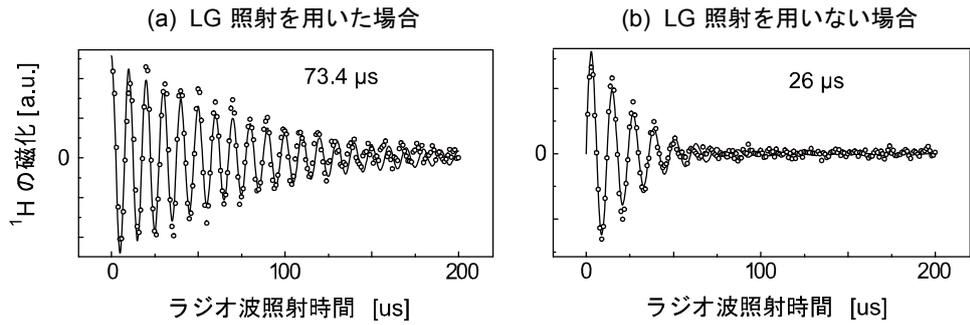


図1-2-1. LG 照射による1量子ビット回転ゲート(Lアラニン)

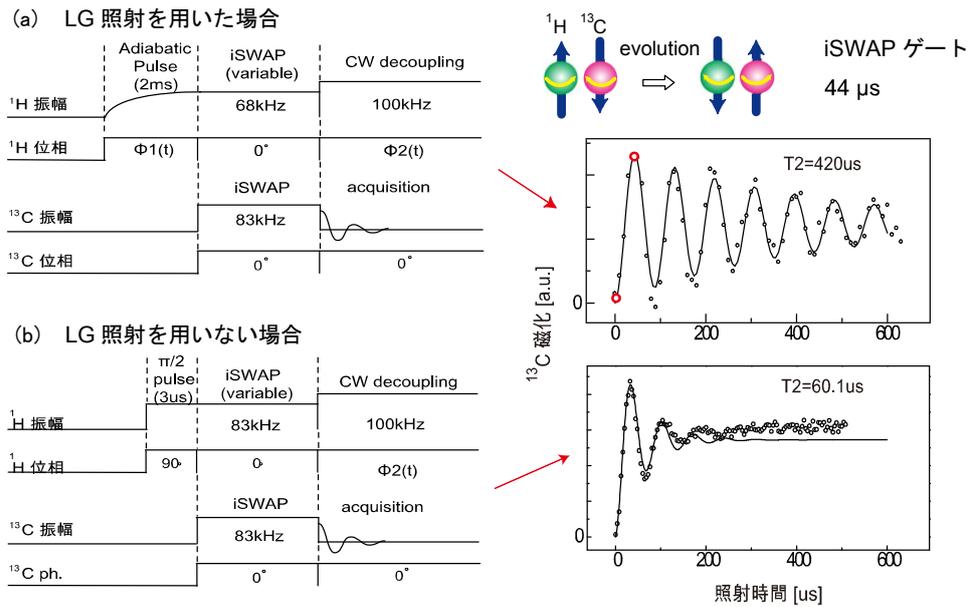


図1-2-2. LG照射による2量子ビット iSWAP ゲート(L-アラニン)

- c) 核スピン間の高効率偏極移動: 線幅が広くても動作する高効率偏極法
 多量子ビットの固体分子を想定して、1-1によって高偏極化したプロトンから異なる核種へ高効率で偏極を移動する方法を研究した。1-1のICPにヒントを得た片方の核スピンに照射するパルスを周波数掃引するNICP法を発展させて、両方の核スピンに照射するパルスを周波数掃引する SADIS CP (Simultaneous Adiabatic Spin-locking Cross Polarization) 法を考案した。[W. K. Peng *et al.*, J. Magn. Reson. 188, 267-274 (2007)] また、それを固体NMR分光に応用した。[W. K. Peng, *et al.*, Chem.Phys.Lett. 468, 531-535 (2008)]
- d) 固体NMR 量子演算に必要な高度なパルス照射を可能なNMR分光計の開発
 固体NMR 量子演算に必要な高度なパルス照射を可能とし、1-1の初期化実験との同期なども可能で、さらには必要に応じてソフトウェア的に機能の拡張が可能なFPGAベース[K. Takeda, Rev. Sci.Instrum. 78, 033103 (2007)]や任意波形発生器(AWG)とデジタルオシロスコープを用いたフレキシブルなNMR分光計を開発した。本研究の多くの実験は、これらの分光計を用いて行った。

1-3 物理的初期化と量子演算を連続して行なう実験系

光励起三重項状態電子スピンを用いた動的核偏極法による物理的初期化(1-1)は低磁場(0.4T)の方が実現しやすく、固体NMRによる量子演算(1-2)は高磁場(11T)の方

が有利である。そこで、これらを両立するために、低磁場で高偏極化した分子試料を、その偏極を劣化させることなく高磁場に移動させ、量子演算を行うフィールドサイクリングシステムを開発した。(図1-3-1~3)さらに、それを用いて、高偏極化した固体の高磁場NMR分光を行った。(図1-3-4)

[A. Kagawa, *et al.*, Rev. Sci. Instrum. 80, 044705 (2009)]

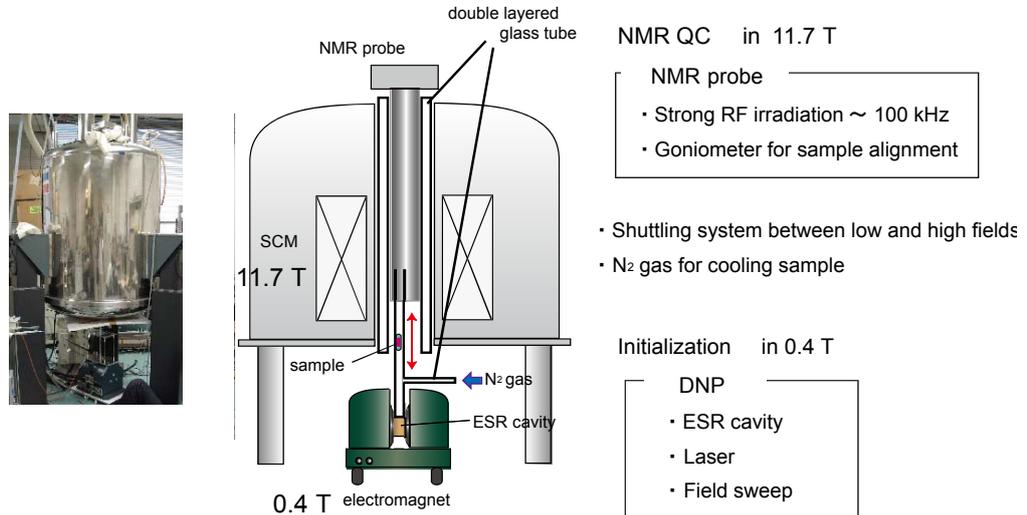


図1-3-1. 光励起三重項低磁場DNP—高磁場NMR フィールドサイクリング装置

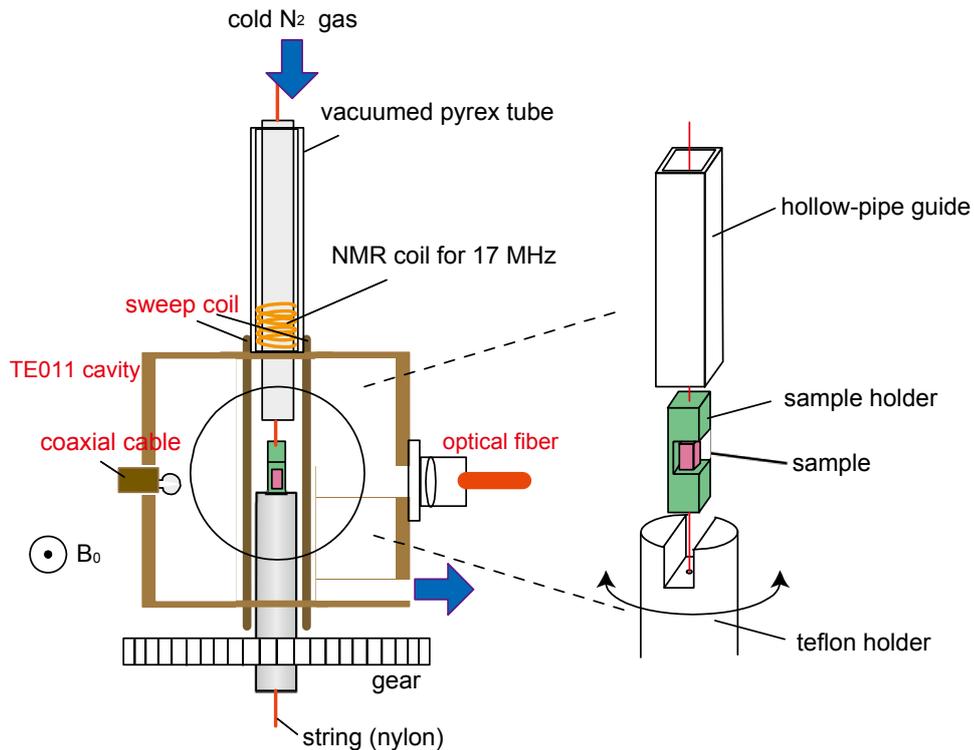


図1-3-2. 光励起三重項DNPによる初期化装置部分

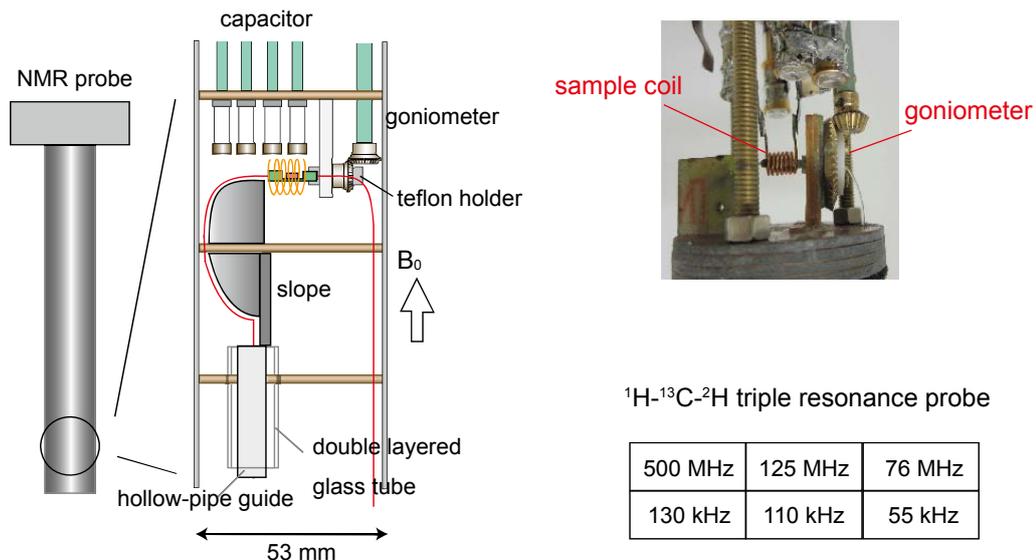
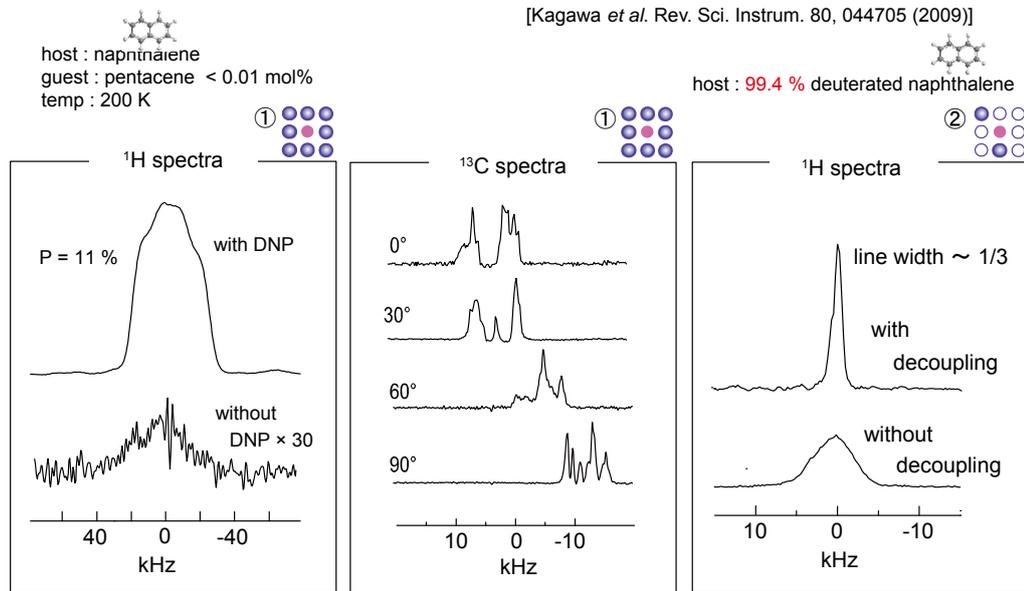


図1-3-3. 高磁場NMRプローブ部分



11.7 / 0.4 ~ 30 times

図1-3-4. DNP/NMRフィールドサイクリング装置による高偏極化固体の分光

1-4 物理的初期化と量子演算を連続して行なう分子系

光励起三重項電子スピンを用いた動的核偏極による物理的初期化(1-1)では、ホスト結晶までの高偏極化を行った。さらに、量子計算に用いる分子を初期化するために、光励起三重項 DNP 可能な分子、量子演算が可能な分子、および、それらを共ドーブできるホスト結晶の探索、および、その他の方法の探索を行った。

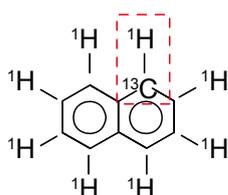
- a) DNP 分子としてペンタセン、ホスト結晶分子としてナフタレン、量子計算分子として $1-^{13}\text{C}$ -ナフタレン(ナフタレンの炭素の一つを ^{13}C ラベルしたもの)
 この量子計算分子はラベルした ^{13}C およびそれと直接結合した ^1H の 2 量子ビット系として扱える。しかし、 ^1H は分子内にもホスト結晶中にも多数存在する。そのため、1-2 b)のLG照射を用いた量子演算を行った。(図1-4-1)
 この組み合わせでは、量子計算分子がホスト結晶分子と化学的に等価であるため、

本質的に良好な結晶性が期待される。しかし、実際には、 ^{13}C ラベルした量子計算分子が非常に高価であるため、ゾーンメルト法による純粋化を省略せざるを得ず、得られた結晶の品質は思わしくなかった。

1- ^{13}C -Naphthalene 5.0 %

^2D -Naphthalene 95.0 %

pentacene 0.005 mol%



iSWAP ゲート 75 us

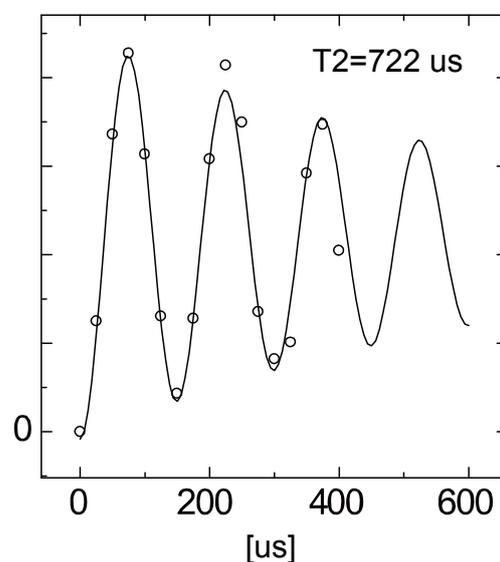


図 1-4-1. 初期化可能な 2 量子ビット分子とそれを用いた LG 照射による iSWAP

- b) DNP分子ペンタセン、ホスト結晶分子ナフタレン、量子計算分子フルオロナフタレン フッ素核スピンを量子ビットとして1つ含むフルオロナフタレン、2つ含むジフルオロナフタレンをペンタセンとともにナフタレン結晶に共ドーピングすることに成功した。1-1の方法でホスト結晶のプロトンを高偏極化し、その後、零磁場付近までサンプルを移動することによって、ホスト結晶のプロトンとドーピングされた量子計算分子のフッ素核の間でスピン拡散を起こさせ、フッ素核スピンを高偏極化した。その後、さらに高磁場にサンプルをシャトルしてNMR分光を行った。(図1-4-2)

host : naphthalene 3.5 mg
 guest1 : pentacene 0.005 mol%
 guest2 : 2-fluoronaphthalene 1.0 mol%

host : naphthalene 2.5 mg
 guest1 : pentacene 0.01 mol%
 guest2 : 2,3-difluoronaphthalene 0.5 mol%

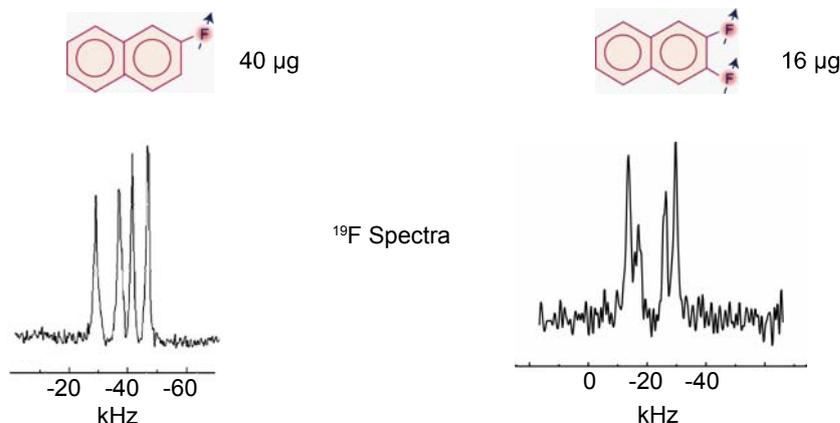


図 1-4-2. フッ素核スピ量子ビットの初期化後のNMRスペクトル

- c) DNP分子ペンタセン、ホスト結晶分子ナフタレンまたは p-テルフェニル、多量子ビット分子
初期化を行った多量子ビット分子で Shor のアルゴリズムによる 15 の素因数分解を行い、真の量子計算を実現するために、3~8 量子ビットの分子を Gaussian03 で探索し、ナフタレンまたは p-テルフェニルホスト結晶へのドーピング実験を行ったが、未だ 3 量子ビット以上の分子のドーピングに成功していない。
- d) 近接DNP
DNP分子と多量子ビット分子の共ドーピングが困難であるため、量子計算用分子をDNPを行うホスト結晶にドーピングせず、近接させるだけでスピン拡散によって偏極を移すという近接DNPのアイデアを考案した。近接DNPの原理確認のために様々な方法でナノ粒子や薄膜のサンプルの作製を試みている。実際にこのようなことが可能であれば、量子計算以外に、NMR分光にも広い応用が期待される。

1-5 混合アンサンブル量子計算と情報理論的初期化の理論

NMR や ESR など混合アンサンブルに対する集合和測定という条件下で可能な量子計算について、理論的に研究を行うとともに、4. 1. 1の物理的初期化の後に行うべき情報理論的初期化アルゴリズムの研究を行った。

- a) 混合アンサンブルにおけるエンタングルメント
NMR などのバルク混合アンサンブルにおける量子もつれについて、Super Dense Coding 実験の考察によって、理論と実験の関係を明らかにした。さらに、量子もつれを検出する witness 演算子を各 qubit の偏極率演算子の線形結合として展開するアルゴリズムを考案し、単一の実験で検出可能とした。
[R. Rahimi, *et al.*, J. Phys. A: Math. Gen. 39, 2151-2159 (2006)]
[R. Rahimi, *et al.*, Phys. Rev. A 75, 032317 (2007)]
- b) 混合アンサンブル量子計算の新たな可能性
混合アンサンブルを用いた量子計算の可能性を理論的に研究し、Bruschweiler のデータ検索アルゴリズムを、全ての解を求めるように拡張した。さらに、その行列積状態(MPS)を用いた数値シミュレーションを行って、NP完全問題である厳密3集合打問題の厳密数値解法とみなして計算量を評価し、他の解法とは異質な Schmidt ランクに依存する計算量を得た。
[A. Saitoh, *et.al.*, Phys. Rev. A 73, 062303 (2006)]
- c) 初期化のためのその場データ圧縮アルゴリズム
混合アンサンブルの情報理論的初期化法として、一般化パスカル三角形と対数桁切り上げ法に基づく独自の数え上げ符号と予備圧縮によるその場データ圧縮アルゴリズムを考案した。

1-6 電子スピン多重共鳴量子演算装置の開発

分子の電子スピンを量子ビットとして多量子ビット演算が可能なパルス電子スピン多重共鳴装置を開発した。

- a) パルス電子スピン多重共鳴装置(図1-6-1)
高周波(高磁場)化による高偏極化と高分解能化と、測定器の高コスト化のトレードオフを考慮して、Ku 帯(~17GHz)を選択した。複数の電子スピン量子ビットに対して、NMR並みに自由自在に任意の振幅・位相のパルスを同時に照射して操作が可能なように、広帯域(バンド幅 5GHz, 10GS/s)の任意波形発生器(AWG)を信号源として採用した。また、ダイナミックデカップリング等のために複数の量子ビットに対して非常に時間幅の狭いハードパルスが打てること、極低温で空洞共振器が高Q化しても過渡現象の補償(1-7)が十分行えること、共振器からの反射と電力増幅器の過

刺雑音を減衰器で軽減すること等を念頭において、電力増幅器の出力電力に十分余裕を持たせた。

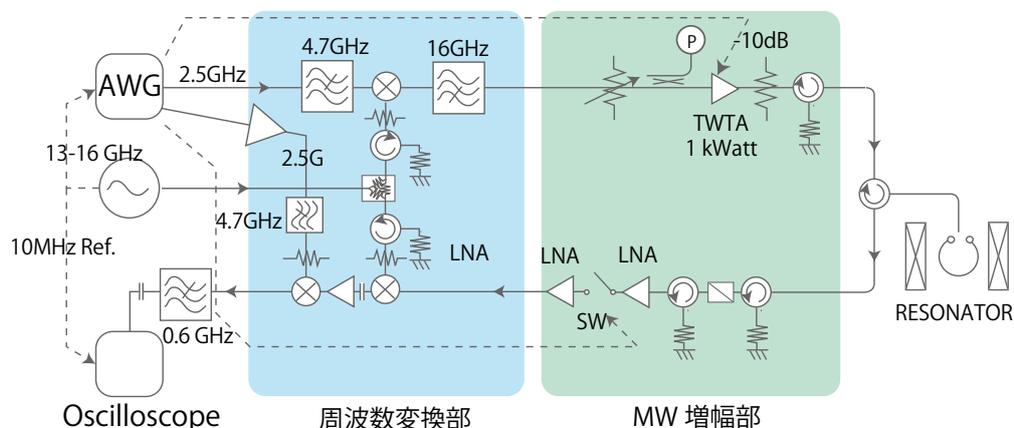


図1-6-1. 任意波形発生器(AWG)ベースのパルス電子スピン多重共鳴装置

b) 極低温装置

Ku 帯(～17GHz)で初期状態として十分な偏極率を達成するためには、電子スピンを 100mK 程度の極低温にする必要があるので、希釈冷凍機を導入した。さらに、低損失でマイクロ波を導入するために、2つの方法を実験した。まず、磁気誘導(ループによるM結合)で銅製同軸ケーブルを熱絶縁する方法を実験し、2～3dBの損失で結合できることが分かった。また、CREST 蔡チームの中村氏(後に当チームにも参加)の協力を得て、超伝導同軸を導入した。

c) 共振器パルス補償

当初計画には無かったが、極低温で空洞共振器が高Q化し共振器内の多重反射によってパルス波形が歪むことが分かり、入射パルスを予め変形しておくことによって共振器内の分子スピンに所望の磁場パルスを印加する共振器パルス補償法の研究を行った。これはNMRと共通の課題として、1-7で詳述する。

d) 共振器

最初、試料を熱コンタクトできる空洞共振器を開発して使用したが、照射効率が低かったため、より高効率照射の可能な誘電体共振器を設計・特注して、使用している。これによって、パルスESR分光が高感度で可能となった。

1-7 共振器パルス補償(追加項目)

高Q共振器内の多重反射による入射パルスの歪を予想して、入射パルスを予め変形しておくことによって共振器内の分子スピンに所望の磁場パルスを印加する方法を開発した。さらに、この手法を1-2の固体NMRにも適用した。

核磁気共鳴(NMR)、電子スピン共鳴(ESR)では、低感度を補うために比較的Qの高い共振器が用いられており、その過渡現象のためにパルスが歪んだり、パルス照射から信号観測までのデッドタイムが長かったりという不都合も生じている。従来は、共振器過渡現象を部分的に打ち消すシャドウパルスを照射するなどの対策も試みられてきたが、人手による調整が必要な割に効果が少なく、未解決であった。

本研究では、1-6のESRの空洞共振器を極低温にしたときに、必然的にQが高くなり、過渡現象によるパルス波形の歪が顕著になって量子演算が不正確になってしまうことへの解決策として、高Q共振器内に所望のパルス波形を実現する方法の研究を開始した。その後、この方法は、誤り耐性閾値を満たす超精密量子演算をESRやNMRで実現するために必須の共通課題として研究を行った。

基本的な考え方は、共振器の応答(過渡現象)を考慮して、入力パルス波形を予め逆方向に変形しておくプリディストーションである。まず、共振器の共振周波数 ω_0 とQ値をパラメータとして与えて、プリディストーションしたパルスを開発する方法やそれを実現する方法(ソフトウェア的なものとハードウェア的なもの)を開発した。この方法は、照射パルスの搬送周波数を共振器の自然減衰周波数に一致させ、 Q/ω_0 に関係する一つのパラメータを調整するだけで簡便な補償を可能にした。

[K.Takeda, Y. Tabuchi, M. Negoro, M. Kitagawa, J. Magn. Reson. 197, 242-244 (2009)]

しかし、搬送波周波数が限定されるため、一つの共振器帯域内の周波数の違いによってアドレスされる電子スピンや同核核スピンの複数量子ビットに適用できないという問題があった。さらに、実際のNMR装置では、複数核を対象とするために共振器が多重共鳴であったり、共振器の前にフィルターが入っていたりするために、単純な共振器モデルでは必ずしも高精度な補償ができない場合があることが分かった。そこで、共振器の応答を実際に測定して、共振器帯域内の任意の周波数でそれを補償するパルスを自動的に生成する方法を開発した。(図1-7-1)[Y. Tabuchi, *et al.*, J. Magn. Reson 204, 327-332 (2010)]

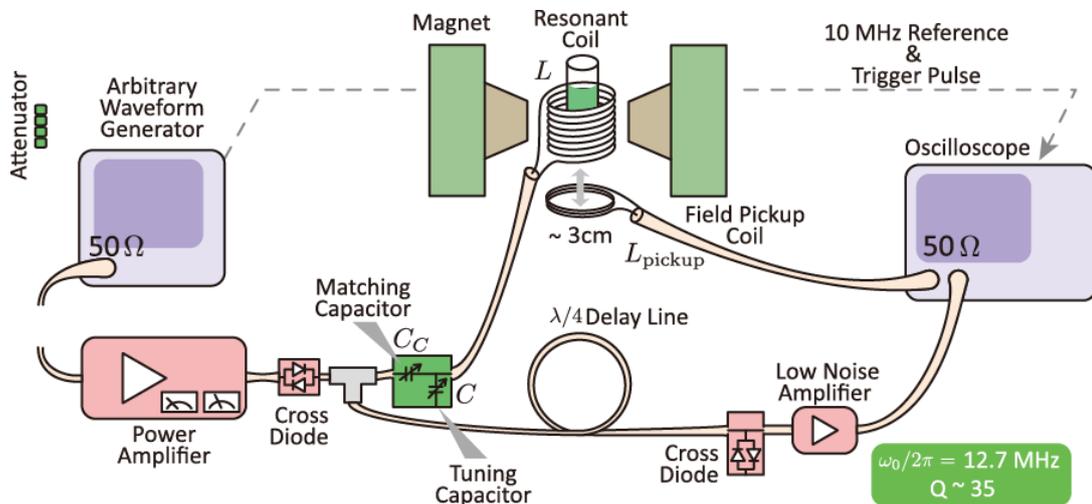


図1-7-1. パルス補償の実験配置

共振器内部で精密に実現可能なパルス波形として立上り・立下りがコサインのパルスが有効であることを見出し、採用した。(図1-7-2 (b))

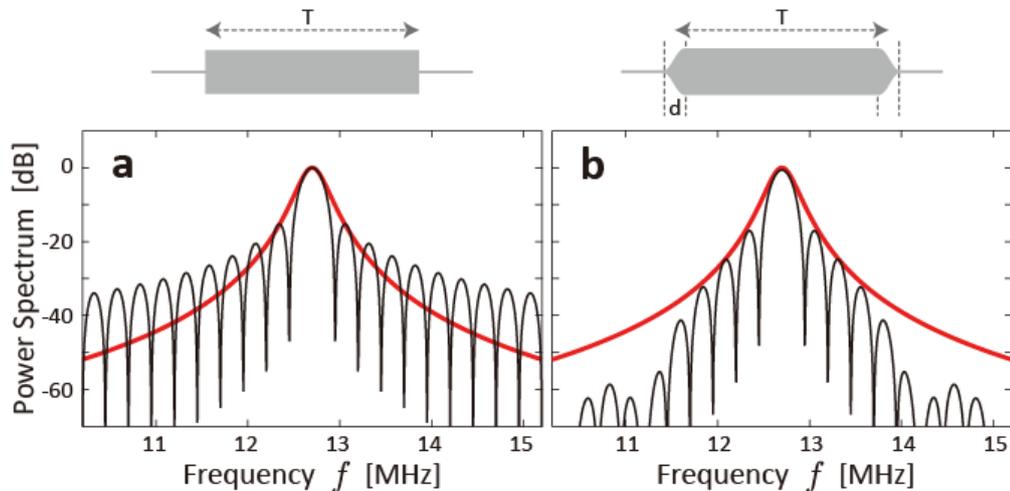


図1-7-2. a 矩形パルスとそのスペクトル, b コサイン立上り・立下りパルスとそのスペクトル

信号発生器(AWG)の電圧から共振器内の磁場までの応答を実測するために、ピックアップコイルで共振器内の磁場をモニターし、AWGからステップ正弦波(図1-7-3 a)を出力して、応答を測定し(図1-7-3 c)、それを数値ラプラス変換して伝達関数を求める。共振器内に実現したい所望のパルス波形(立上り・立下りコサインパルス(図1-7-4 a))をラプラス変換して、それを伝達関数で割って、数値逆ラプラス変換して、補償パルス波形(図1-7-4 b)を求め、それをAWGで発生させる。

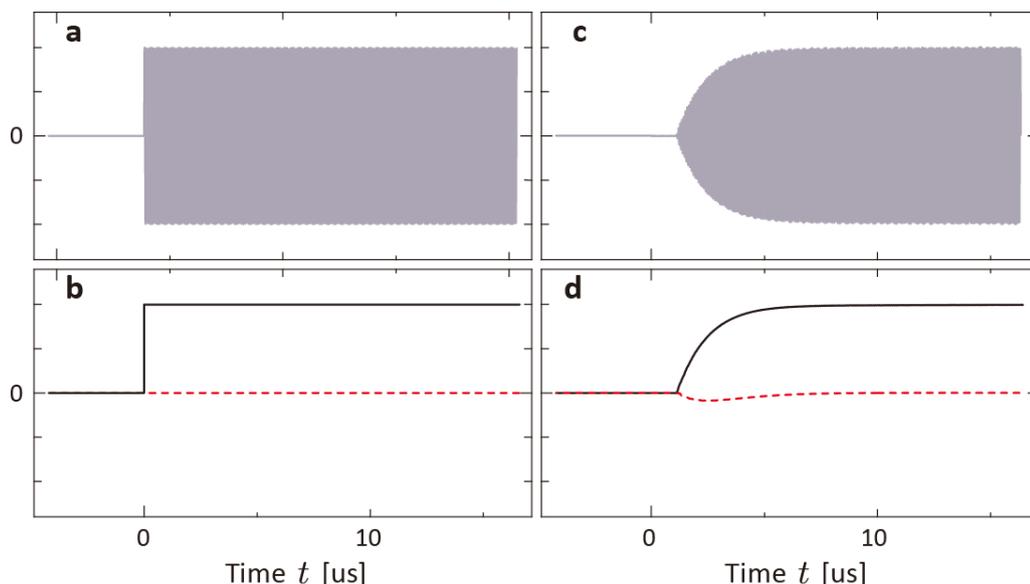


図1-7-3. a 伝達関数測定用ステップ正弦波入力、c 応答、bd は ac の IQ 振幅

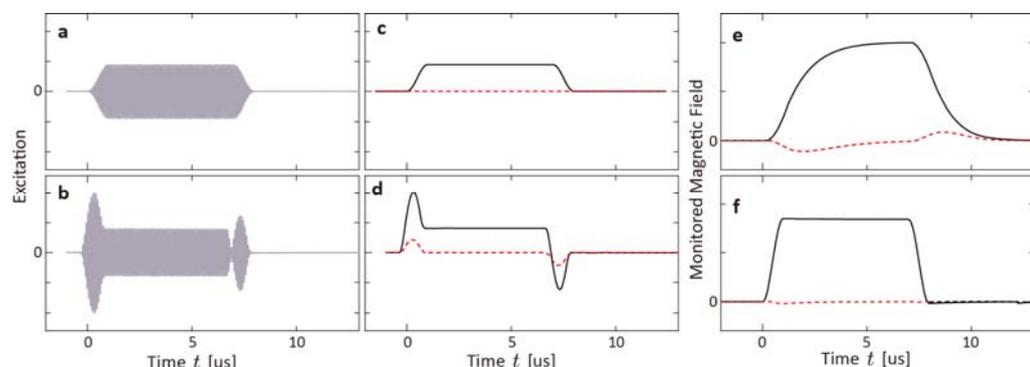


図1-7-4. a コサイン立上り・立下りパルス、b 補償パルス、c d は ab の IQ 振幅、ef は a を補償せずに印加した場合と補償して b を印加した場合の共振器内磁場の IQ 振幅の実測値

共振器過渡現象を補償せずに、パルス面積を変えながら核スピンの応答を観測すると、 π パルスでも位相過渡現象のために応答は消えず分散波形が残る(図1-7-5 a)。それに対して、この方法でパルスを補償すると、 π パルスで応答が消えて零クロスする(図1-7-5 b)。また、パルス照射直後の信号を観測すると、補償しなかった場合は共振器から指数的に減衰する長いテールの信号が出るが(図1-7-6 a)、補償した場合はパルス照射直後に急峻に減衰する(図1-7-6 b)。このことから、パルス補償が共振器内の多重反射テールを打ち消す効果があることが分かる。ただし、AWGのD/A変換の縦分解能不足や実験系に含まれる増幅器やダイオードなどの非線形性のために、デッドタイムの短縮効果は限定的であり、まだ改善の余地がある。

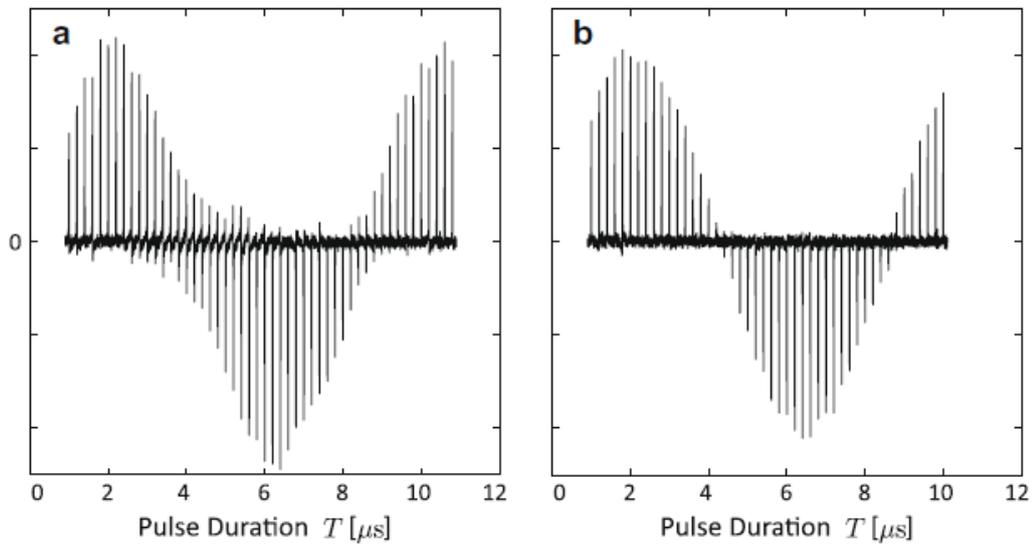


図1-7-5. ラビ振動に現れる位相トランジェント(a 共振器補償無し、b 共振器補償あり)

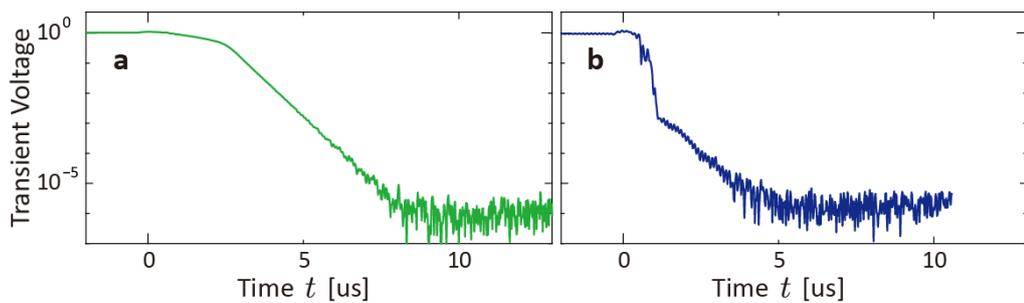


図1-7-6. 共振器パルス補償によるデッドタイム短縮

(2)研究成果の今後期待される効果

1. 光励起三重項を用いた超偏極化と高磁場NMRのフィールドサイクリング

核磁気共鳴(NMR)は発明から60年間、化学、生命科学、物理から医療まで分析法として今日でもますます幅広く使われているが、その最大の欠点は感度の低さであった。本研究とほぼ同時期に、極低温の熱平衡電子スピンを用いた動的核偏極によって核スピンを高偏極化してNMRを高感度化する技術が、MITのグリフィンらによって実用化され、ブルカーやオックスフォードなどの企業で製品化されるに至った。極低温や超高周波高出力の発振器(ジャイロトロン)など、高価で取り扱いの難しい設備が必要であるにも関わらず、この高感度化技術は急速に普及しつつある。NMRの高感度化に対する社会的ニーズが、ある程度コストを度外視してもそれを必要とする臨界点に達していたことを示している。一方、この技術が普及するに従って、極低温で分析対象の物質構造が変化してしまうことなど、その問題点も明らかになってきた。

本研究では、極低温の代わりに光励起三重項状態を用いた動的核偏極によって20%台後半の超高偏率を分単位の短時間で実現し、超高偏極化した試料を高磁場に移動して高分解NMR分光を行うフィールドサイクリングシステムを開発した。これは、極低温を必要とせず、常温で分析対象を超偏極化できるという大きな利点がある。そのた

め、生体分子など、特に、常温での構造解明が望まれる分析対象に対して、威力を発揮することが期待される。

今後は、量子コンピュータに限らず、NMR分析一般への応用も視野にいて、この技術を展開して行く予定である。

2. 共振器パルス補償とデッドタイムフリー磁気共鳴

NMR、MRI、ESRなどの磁気共鳴では、低感度を補うために高Q共振器が用いられており、その過渡現象のためにパルス波形が歪んだり、パルス照射から信号観測まで長いデッドタイムがかかったりする問題があった。従来は、過渡現象を部分的に打ち消すシャドウパルスを調整して照射するなどの対策が試みられてきたが、効果が限定的で、未解決であった。

本研究では、共振器の応答を実際に測定して、それを補償するプリディストーションを行ったパルスを自動的に生成する方法を開発した。これによって今まで、磁気共鳴の世界では試行錯誤的にしか対処されてこなかった共振器過渡現象の問題を、系統的かつ自動的に解決する方法を与えたことになる。この技術がNMRやESRの分光計に組み込まれれば、これまでパルス不完全性やデッドタイムのために隠れていた信号が見えるようになり、多くの科学分野に波及効果が期待される。デッドタイムを完全に解消するには、アンプやダイオードの非線形性も含めた補償と、D/A変換器のダイナミックレンジで制限されている補償精度の大幅な改善が必要と考えられる。既に、非線形補償とダイナミックレンジ拡大のための数値的 $\Sigma \Delta$ 変調の研究に着手しており、NMR分光に大きな革新をもたらすデッドタイムフリーNMRの実現を目指して研究を継続する予定である。

また、量子情報処理技術では多くの物理系で共鳴の母として磁気共鳴の技術が使われており、このパルス補償の技術も多くの物理系で量子演算精度の向上に貢献することが期待される。

4. 2 分子電子スピン(大阪市立大学 工位グループ)

(1)研究実施内容及び成果

化学結合に直接的に与らない電子スピンをもつ開殻系分子である「分子スピン」には、人工原子系の qubit などとは異なり、これまでに蓄積された、有機磁性・分子磁性体研究の成果の上に立って適切な量子化学的な考察を行えば、目的の分子スピンを設計することができる利点がある (tailor-made molecular design)。分子スピンは自然が与えた電子スピン及び、分子の構成要素である多数の原子核スピンをもつために、qubit として早くから注目され、特に核スピンは NMR アンサンブルコンピュータとして登場し、実際に量子アルゴリズムに基づく素因数分解に使われ、量子コンピュータを身近なものにする役割を果たした。一方、分子スピながもつ電子スピンに関しては、初期化には有利であるにもかかわらず、qubit として利用できる分子の具体的な存在 (synthetic matter spin-qubits) が検証されたことはなかった。これは、synthetic electron spin-qubits が物質として見出され、同定されていなかったこと、及び qubit としての固有スピン状態を制御するマイクロ波パルス技術が未熟であり qubit 間の位相制御を可能とする技術的方法が確立していなかったことに尽きる。一方、scalable qubits の集積体を構築する上で、1次元周期性を巧妙に利用した Lloyd qubit array モデルが、有力な物質系として理論的に早くから提案されていたが、物質合成の点から試みられたことはなかった。本 CREST では、これらの課題に取り組み、分子スピン qubit をベースとする量子コンピュータ/量子情報処理技術の開発に寄与することを目指した。

本研究課題に関して、研究開始時の3つの達成目標は、

2-1. 分子スピン系で電子スピンの2-及び3-qubit を分子設計・合成し、基本的な量子ゲート操作の実行を可能とする、デコヒーレンス時間の長いアンサンブル分子スピン電子スピン qubit 系を物質開発すること (synthetic electron spin-qubit の概念確立)、

2-2. 分子スピン qubit 系の電子スピン間の位相制御を実行できる QC spectroscopy (CD-ELDOR: Coherent Dual Electron-Electron Double Resonance spectrometer: CD-ELDOR) の装置及び技術開発を行うこと、単一 electron spin-qubit 位相制御及び2-electron qubit の CNOT ゲート操作の実現、

2-3. 最終年度までに、synthetic matter spin-qubit の利点を活かした scalable な電子スピン系のモデル系を設計・合成し、この課題に対する研究の端緒を開拓することであった。

全体としての研究成果に関しては、2-1 では、新規な物質設計・開発であるために、time-consuming な作業を要するので、初年度から人材を投入して、中間評価の時期までに具体的な分子スピン系を得て、最終年度前半期に基本ゲートの確立実験を成功させた。2-2 では、2年度内に1号機を完成させ、分子スピン qubit の位相を制御できる要素技術を確立し、稼動させた。2年目以降は、長時間の測定に対応するために、液体ヘリウム大容量の新型のクライオスタット2号機を設計し、長時間稼動体制をルーチン化した。2-1 との関連で、現在の電子磁気共鳴の技術水準で最高2つの周波数の異なるマイクロ波励起パルスを高周波数帯(Qバンド 35GHz 帯)で生成できるだけでなく、両者の位相を自在に制御できることを初めて実現した (Coherent Dual Electron-Electron Double Resonance: CD-ELDOR)。一方、信号の積算などを考慮した実際的な QC/QIP (量子コンピューティング/量子情報処理) 実

験には、擬初期状態の生成が必要であるが、これを電子スピン qubit を使って生成するには、さらに複数(最低 1 個)の追加マイクロ波パルス系列が必要であること、従って今後、個々の電子スピン qubit を QC/QIP で操作するには任意の数の強出力マイクロ波パルスを生成し、相対位相を制御できるパルスマイクロ波分光法を考案・確立することが急務であることを具体的に示した(マイクロ波分光技術の NMR パラダイムシフト)。2-3 では、DNA バックボーンを形成する 2 重螺旋構造からヒントを得て、3 回螺旋対称性を取り入れた g-tensor engineering 設計を考案し、最終年度を待たずに中間評価までに、Lloyd モデルの電子スピン qubit 版の基本単位を合成し、addressable qubit が分子系で実現していることを、構造面からは X 線構造解析によって、スピン物性の面からは電子磁気共鳴法によって、それぞれ証明した。

CREST 研究期間中に、国際的には分子スピン solid-state QC として、窒素核内包 C60 フラーレンや放射線損傷アミノ酸結晶中の有機ラジカルを qubit として活用する研究、電子スピン qubit のデコヒーレンス時間の延長パルス技術に関する研究が欧州を中心に報告され始めたが、分子中の複数の電子スピン qubit を直接扱って、論理ゲートなどを構成する報告は、我々の研究を除いて現時点ではまだない。特に、scalable qubit への本研究のアプローチは、量子情報科学系のみならず、分子磁性、電子スピン磁気共鳴関連の国際会議(全体講演、トピックス招待講演)などでも、注目を集めつつある。

上記 3 つの達成成果に関する詳細は、以下のとおりである。

2-1. 分子スピン系で電子スピンの 2-及び 3-qubit を分子設計・合成し、基本的な量子ゲート操作の実行を可能とする、デコヒーレンス時間の長いアンサンブル分子スピン電子スピン qubit 系を物質開発すること(synthetic electron-qubit の概念確立)：

分子スピンの電子スピン qubit を得る、分子設計の指針は、(A) DiVincenzo's Five Criteria、及び(B)個々の電子スピン qubit にアクセスする電子磁気共鳴の手法(g-tensor engineering)において、今日のマイクロ波パルス技術の制約を回避するための物質設計戦略に依拠する。(B)での技術的な困難は、マイクロ波パルス強度と時間分解能の低さに由来し、事情はラジオ波帯域を扱う NMR とは大いに異なる。(B)に関連して、これまで分子の電子スピン間に働く量子力学的な交換相互作用を人為的に制御すること、特に望む大きさに弱めて qubit として活用する分子設計は皆無であった。しかも QC の演算には、技術の制約内で電子スピン磁気双極子相互作用を利用するために、交換相互作用と磁気双極子相互作用の大きさの間には絶妙のバランスが設計には不可欠である。

分子設計の初期段階では、量子化学的には、分子内で有効に働く π 電子系と単結合系から交換相互作用を見積ると同時に、どのような反磁性結晶格子中に分子スピン系を磁氣的に希釈するかを考察することになる。図 2-1-1 には、すでに知られている代表的な biradical について、溶液中の電子磁気共鳴 CW スペクトルを参考のために与えた。ここでは、溶液系であるために、異方的な電子スピン磁気双極子相互作用は消失し等方的な交換相互作用のみが残っている。図 2-1-2 には、これらのスペクトルが、交換相互作用 J と窒素核 ($^{14}\text{N}; I=1$) の等方的な超微細結合定数 a との相対的な大きさの関係でどのように依存するかを模式的に theoretical stick spectra で与えた。図 2-1-1 中、(a)に与える biradical は、反転対称構造をもち、溶液スペクトルから交換相互作用もほとんど消失していると思われていた典型的な例であるが、実は反磁性結晶格子内でも反転対称構造は維持していても、2 MHz の大きさの交換相互作用が存在することが、超微細構造スペクトルの全解析から分かり、本課題でターゲットとする 2-qubit 電子スピン系であることが分かった。(a) (図 2-1-1 参照)の biradical は、厳密な反転対称構造をもつために、交換 parity の性質から、個々の電子スピン qubit は等価な g-tensor をもち、両者を区別して励起することはできない。そこで、電子スピンがほぼ局在する NO 基の核スピン(窒素核: $^{14}\text{N} (I=1)$) の安定同位体 ($^{15}\text{N} (I=1/2)$) を、片方にのみ合成的に導入して、交換 parity を破る設計

法 (pseudo g-engineering: hyperfine(A)-tensor engineering) によって、addressable synthetic electron spin-qubit に変身させることができる。(a)では、反磁性単結晶中では電子スピン双極子相互作用が 30 MHz 程度あり、外部静磁場方向に依存して、電子スピン磁気双極子分裂が観測される。従って、 g 値は同じでも同位体の超微細相互作用の大きさの違いを利用して、個々の電子スピン qubit にアクセスし、電子スピン qubit リソースとして活用できることを本研究課題において初めて実証した。

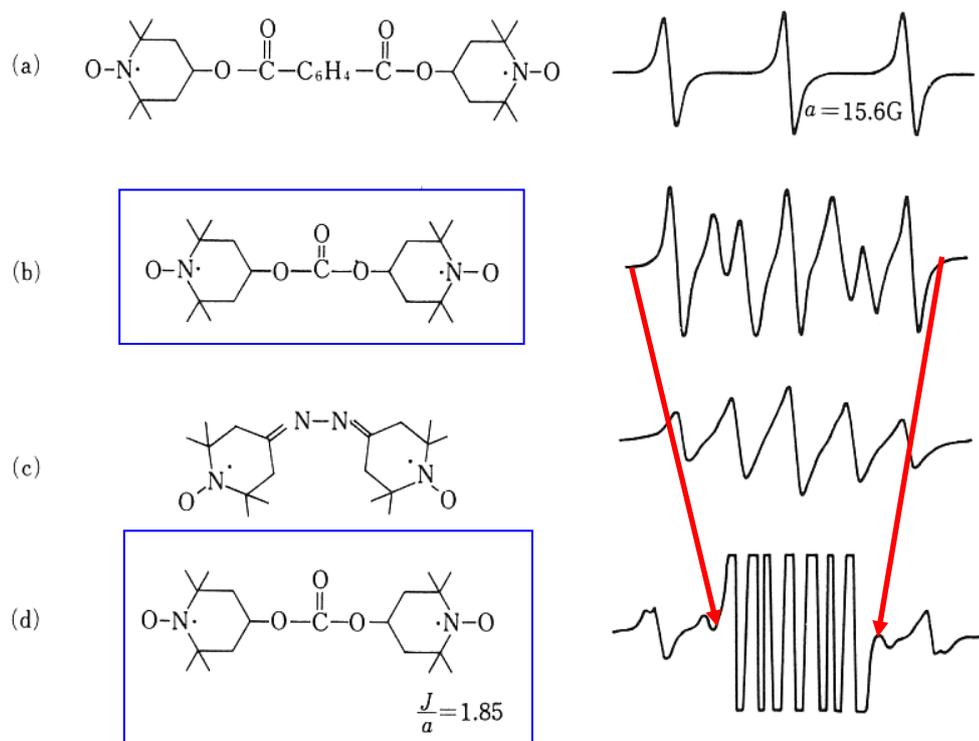


図 2-1-1. 等方的電子スピン交換相互作用の大きさと溶液中の超微細構造スペクトルに現れる biradical の交換相互作用由来の分裂。

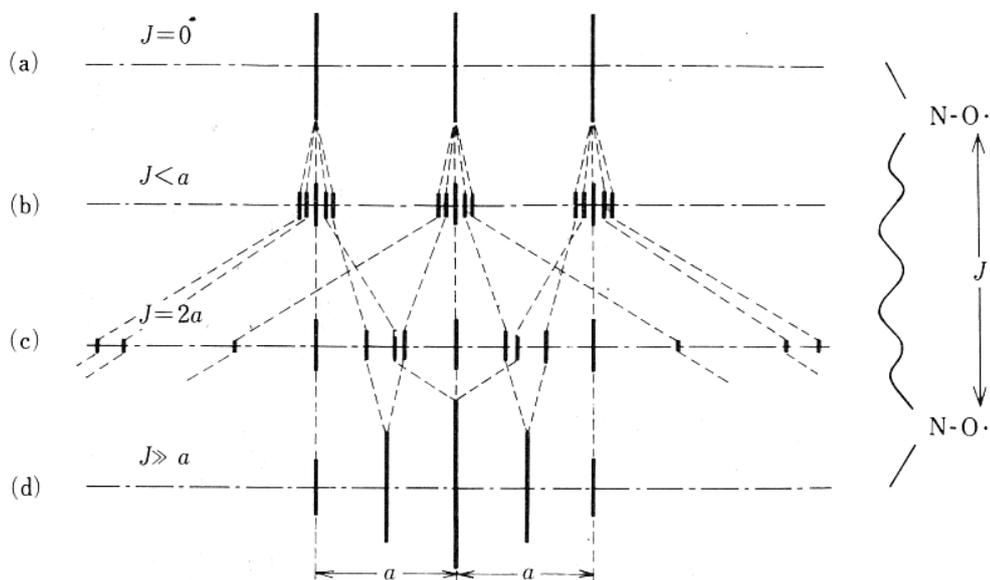
(a)の biradical では交換相互作用は消失しているが、(c)では交換相互作用が窒素核の超微細結合定数よりもはるかに大きく、電子スピン量子数 S は $S = 1$ となり、射影演算子の寄与のために、超微細結合定数が $1/2$ となる。(b) (及び(d))では、(a)と(c)の中間的な状態 (交換相互作用 J と超微細結合定数 a が競争的な関係にある) に特徴的な複雑なスペクトルを示す。

g -tensor engineering 分子設計の本流は、複数の電子スピンサイトの g -tensor を不等価に配置する設計法であるが、有用な分子スピンの中には、反磁性結晶格子中で反転対称構造を有する分子も多いので、pseudo g -tensor engineering の設計指針は電子スピン qubit 系リソースを広げるためだけでなく、将来窒素核を electron-bus qubit 系の client qubit リソースとして活用する時にも有用なアプローチである。

電子スピンの qubit アンサンブル系を得るには、当然分子スピン系そのものの電子・分子構造を反映した結晶構造解析も重要であるが、ターゲットの分子スピンを望む濃度で、反磁性単結晶格子内に反磁性分子の結晶対称性を維持したまま、分子スピンを取り込むことができるかが qubit としての可否を握るために、反磁性ホスト分子の結晶成長技術、X 線構造解析の成否は、現実的な qubit を実験的に得る時の最重要なステップになる。

ターゲット分子スピンと対をなす反磁性分子の設計は、結晶の並進群などさまざまな要因があるが最終的に、分子スピンを化学的に安定に、かつ望む濃度で取り込むことを優先させて、電子スピンサイトのニトロオキシド NO を、NOH あるいは C=O の電子的に閉殻構造

をもつ官能基に置換した反磁性分子種が最適であることが分かった。特に、ケトン基 C=O は、すべての対応する分子スピンを化学的に著しく安定に取り込むことが分かった。図 2-1-3 には、これらの対のうち代表的な組み合わせを例示する。



J : intra-molecular exchange coupling
 a : isotropic hyperfine coupling constant due to ^{14}N

図2-1-2. 交換相互作用 J と窒素核($^{14}\text{N}; I = 1$)の等方的な超微細結合定数 a との相対的な大きさの関係でどのように依存するかを模式的に示した電子スピン磁気共鳴理論スペクトル(theoretical stick spectra)。

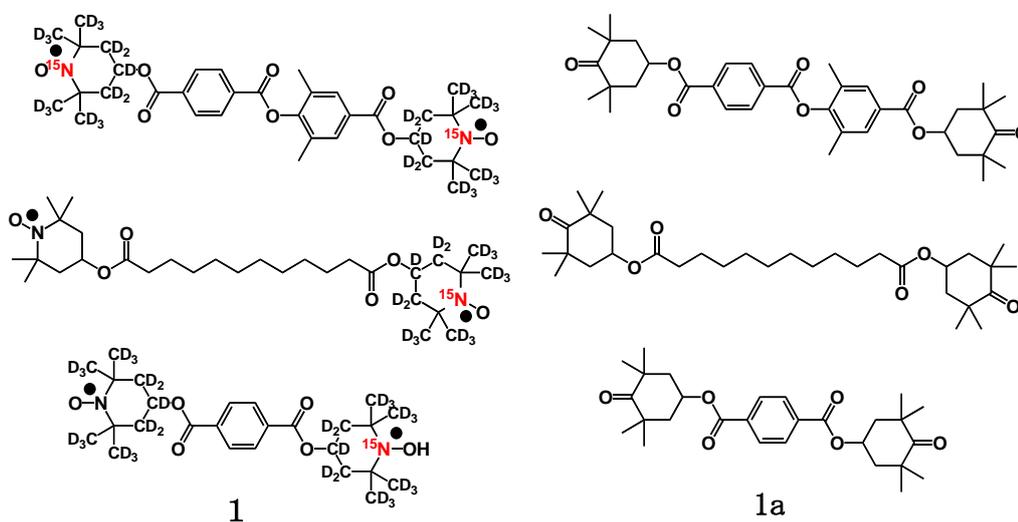


図 2-1-3. 代表的な 2qubit 分子スピン (biradicals: 左) と対をなす反磁性分子ジケトン (右)。

反転対称構造が安定な分子スピンには、pseudo g-tensor engineering 分子設計 (^{15}N 核の導入) が施されている。電子スピンサイト NO に隣接するメチル基 CH_3 は一部を除いてすべて重水素化されている。重水素化により、軽水素の超微細結合に由来する線幅広幅化を大幅に遅減することができる。分子スピンの一部及びすべての反磁性分子の X 線構造解析がなされ、化学結合長、結合角はすべて決定されている。

図 2-1-3 には、g-tensor engineering が成功した代表的な分子スピン系 (磁気的な希釈単結晶) の対を例示しているが、本研究課題の実施中に分子設計し、実際に合成に成功した分子スピン、及び対を成すジケトン分子の組み合わせは、60 種類を超える。良質の磁気的な希釈単結晶を生成し、X 線構造解析に成功するだけでなく、並進群を考慮して、QC/QIP のパルス磁気共鳴実験に供することができる希釈単結晶系のうち、デコヒーレンス時間の長い synthetic electron-spin qubit を選択するプロセスが次のステップである。ほとんどの希釈単結晶系において、磁気的な希釈比、分子スピングuest/反磁性ジケトンホストは、1/5 から 1/1000 までの範囲で制御可能である。現在までに得られた、デコヒーレンス時間の上限は、広範囲の温度領域で、 T_2 の測定において μ sec である。さらに、スピン緩和時間の測定において、分子間、及び分子内からの寄与による異方的な緩和を識別できる重要な結果が得られたが、これは当初予期せぬ結果であった。

また、開殻系分子は一般的に不安定であるとの主張が putative in chemistry、あるいは化学的な常識であるが、これに対しては、本研究課題で合成した、すべての分子スピン qubits について、反磁性単結晶格子中では、強力な CW 及びパルスマイクロ波、ラジオ波に対して化学的に不安定であることは一切なく、「常識」に反して輻射場に対する安定性は極めて優れている物質群であることがわかったことは、本 CREST で得た大きな成果の一つである。これは、electron spin-qubit として、分子スピン系よりも開殻金属イオン系が物質安定性の面から優れているのではないかとする一般的な予想に対して異なる回答を与えるものである。

3-electron spin-qubit 分子スピン系の合成、及び磁気的な希釈単結晶系の探索の課題では、大きな進展があった。図 2-1-4 に、これらの guest 分子 triradical 及びトリスケトンのホスト分子を示す。結晶格子中での分子構造において、両者の類似性は著しく、guest の triradical はホスト結晶中に自在に取り込まれるので、guest の濃度の制御は容易である。Triradical は、図 2-1-5 に示す場合と同様に、電子スピンスイトを結ぶ二等辺三角形を形成し、二つの弱交換相互作用で特徴付けられる。この Triradical は、超微細相互作用、電子スピン磁気双極子相互作用、交換相互作用の大きさが競争する系であり、超微細相互作用がすべての電子スピン磁気共鳴遷移に介在する極めて複雑な 3-electron-spin nuclear-spin 分子スピン系である。

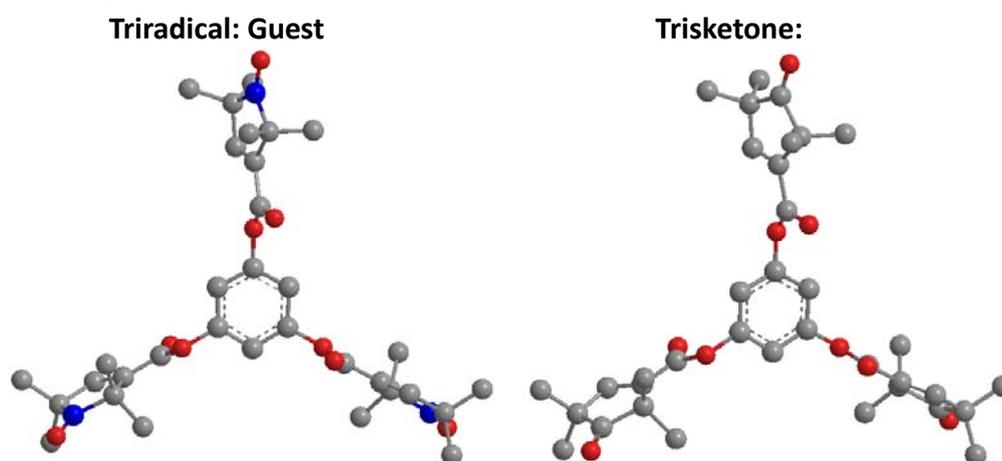


図 2-1-4. 3-qubit 弱交換相互作用分子系 Triradical (左)、及びトリスケトンホスト分子 (右) の分子構造 (X 線構造解析の結果にもとづく)。窒素核は、すべて ^{14}N 核である。ここでは、電子磁気共鳴スペクトルの単純化のためのスピンスイト NO の ^{15}N 同位体置換はされていない。Triradical (左) において、青色球は ^{14}N 核を示す。

2-2. 分子スピン qubit 系の電子スピン間に位相制御を実行できる QC spectroscopy (Coherent Dual Electron-Electron Double Resonance spectrometer:CD-ELDOR) の装置及び技術開発を行うこと、単一 electron spin-qubit 位相制御及び 2 electron-qubit の CNOT ゲート操作の実現：

Probe head

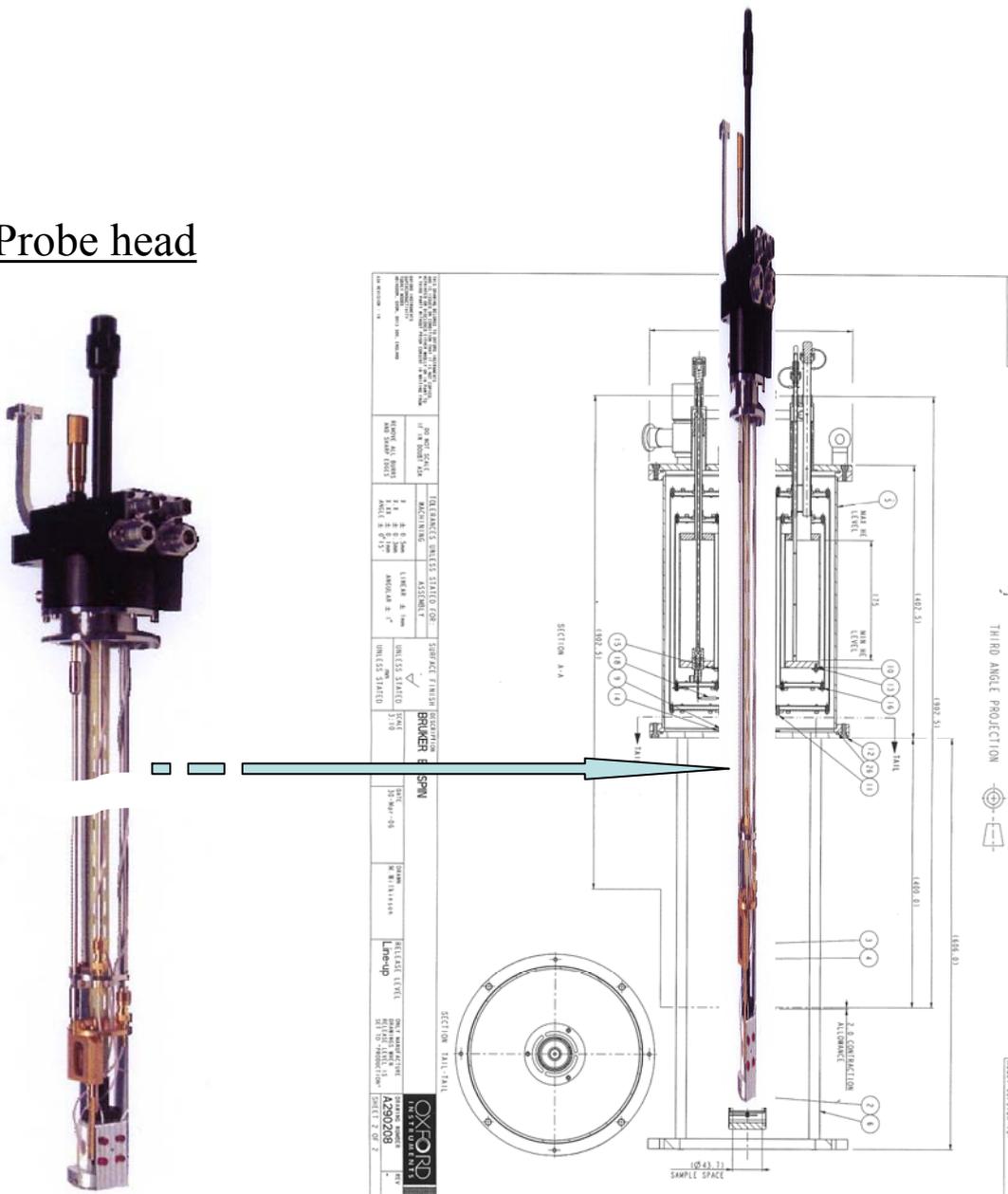


図 2-2-1. coherent dual 電子スピン-電子スピン二重共鳴(CD-ELDOR)用 probe head の概観及び第 1 号クリオスタットの内部を示す。

本課題では、AWG を本体とする任意マイクロ波周波数パルススキームに準じるアプローチ、及び複数のマイクロ波源を外部ロック方式によって位相制御する第 2 のアプローチが当初計画された。当初計画の第1のアプローチでは、ラジオ波を任意に制御する技術で、マイクロ波を等価に扱うスキームが検討されたが、周波数が 2 桁も異なるために適当なデバイスが見出せず、CREST 推進期間内に目標の技術を達成することはデバイスの開発

を伴うために技術的に困難と判断して、第2のアプローチへ移行した経緯がある。

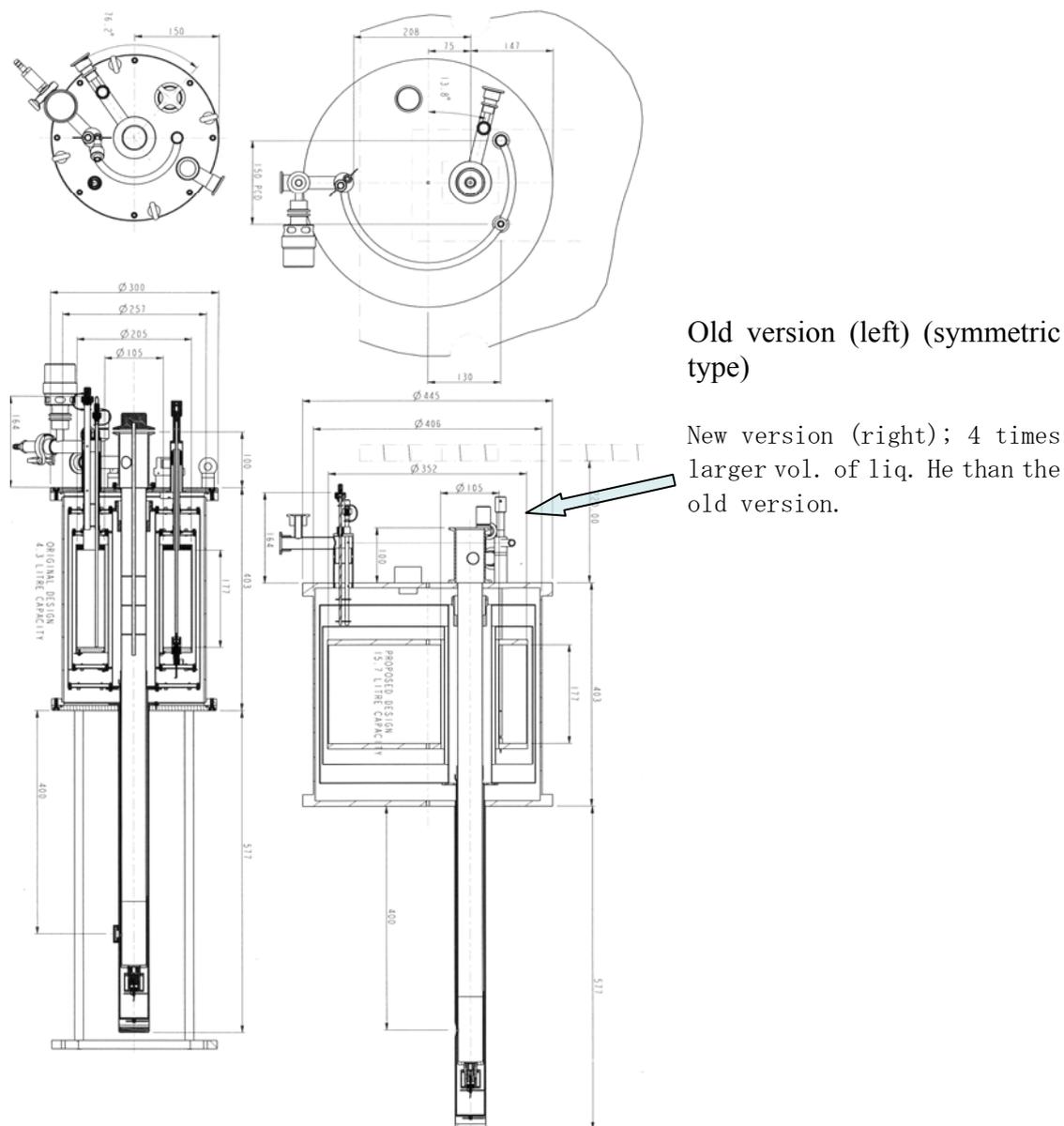


図 2-2-2. coherent dual 電子スピン-電子スピン二重共鳴(CD-ELDOR)用クライオスタット 2号機(右)の設計図・内部。左には、1号機を比較のために示す。なお、Probe headは共通仕様である。

本 CREST では、2 個の異なるマイクロ波周波数をパルス化して、任意の相対位相関係で周波数掃引できる、coherent dual 電子スピン-電子スピン二重共鳴(CD-ELDOR)を Bruker Biospin 社と共同開発した。図 2-2-1 には、第 1 号クライオスタット設計図面と Q-バンド probe head の外観を示す。その後、1 号機の性能アップ(低温稼動時間の大幅延長)をはかるために、新たに非対称偏芯型ヘリウム大容量クライオスタットを設計し、オックスフォード社と共同開発した。非対称クライオスタットとしては、最初の製品である(図 2-2-2 参照)。

一方、synthetic electron spin-qubit の初期化条件を容易にするためには、周波数はでき

る高いマイクロ波が有利であるが、ヘリウム温度下での実験の容易さとのトレードオフによって、マイクロ波周波数は、Q-バンド帯域を採用した。従って、初期化条件は、超流動状態の 1.4 K で達成できることになり、図 2-2-2 に示す、Q-バンド専用液体ヘリウム半浸潤型クライオスタットは、汎用性の高い装置である。

図 2-2-3 には、coal サンプルについて、外部ロック方式により実現した、Q バンドマイクロ波2周波数間の相対位相制御の実験的証拠を示す。第 2 周波数との位相差が、 $2\pi \Delta \nu t$ であらわされるので、オブザーバー第 1 周波数 ν_1 のスピネコー信号が、 $\Delta \nu$ の関数として変動・減衰する振る舞いが観測されていることから、coal 内の異なる電子スピン束に共鳴する信号間の相対位相が制御されていることを示す。位相が制御されていないならば、 $\Delta \nu$ の関数で時間変動することはない。

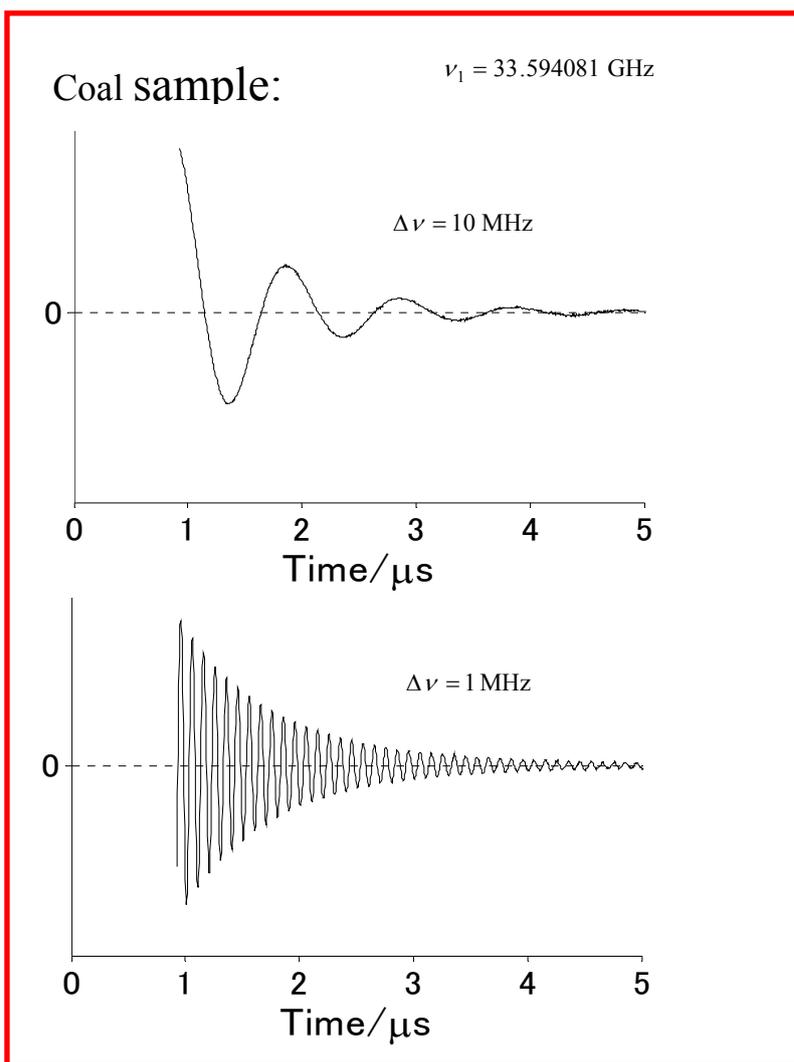
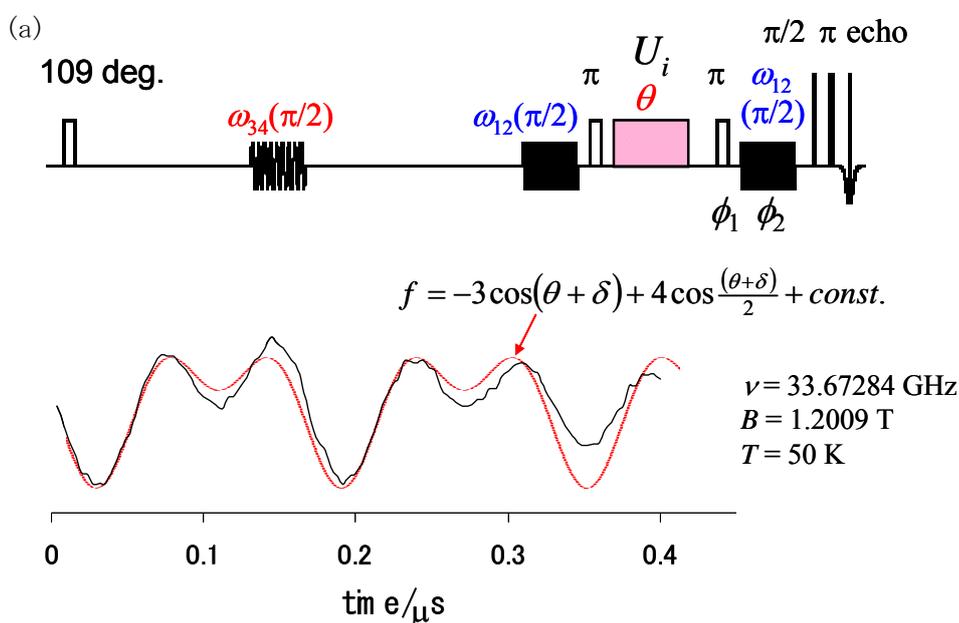


図 2-2-3. 周波数の異なる電子スピンの相対位相が制御されている様子示す、スピネコーの減衰曲線。抱絡線は、coal sample の減衰曲線に対応する。

異なるマイクロ波周波数の相対位相が制御されることによって、coherent dual ELDOR(電子スピン-電子スピン二重共鳴)技術が完成したことになるので、デコーヒーレンス時間の十分長い synthetic electron spin-qubit 系が合成できれば、CD-ELDOR 技術でも electron-spin entanglement の生成を証明できる。CD-ELDOR 装置は、当初の設計

仕様から時間分解能を大幅に改善するために、40W の外部付け Q バンド TWT マイクロ波増幅器を導入して、100 倍の高出力を得ている。開殻金属イオン系錯体 qubit にアクセスするには、まだ出力不足であるので、今後さらに X バンド周波数帯域と同等な 40-100 倍の高出力を得る必要がある。

本 CREST おいては、spin qubit の位相制御の確立は、qubit 間の entanglement の生成を直接的に評価するスピン操作技術として重要視してきた。この過程において、電子スピンと核スピン qubit を等価に扱って生成した、電子-核スピン（水素核）の擬似 entanglements から、電子スピンのスピノールを直接実験的に証明することができた。図 2-2-4 には、電子スピンのスピノールを証明したパルス系列、及び 4π 周期性のタイムプロファイルを示す。ここでは、 U_i 操作（マイクロ波のパルス長）の関数として、電子スピンエコーの強度を読み出しにも用いている。 ω_{34} は核スピンを操作するラジオ波、 ω_{12} は電子スピンを操作する Q バンドの共鳴マイクロ波の共鳴周波数である。スピノールの直接観測は、電子スピン qubit を含む擬似 entanglement を介して初めて達成されたものであることは、注目に値する。同様の実験は、水素核スピン ($I=1/2$) に対しても行うことができる。



ESE signal intensity as a function of MW pulse length U_i

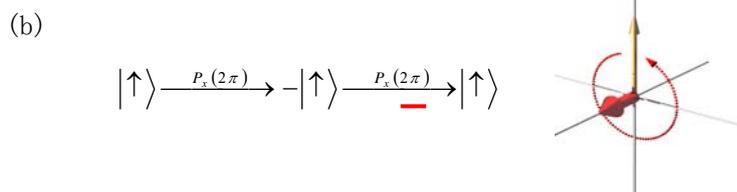


図 2-2-4. 電子スピン qubit のスピノールを直接観測した、ラジオ波・マイクロ波パルス系列(top)と電子スピンのブロッホ球の二つの極を回るときに 4π 周期性を示す(b)、電子スピンエコー信号((a)下)。

g-tensor engineering で分子設計し、個々の電子スピン qubit に対してアクセスできる典型的な分子スピン系 (図 2-2-5 に示す分子 1) は、先に図 2-1-3 の top に例示したが、電子スピン共鳴信号の線幅を一層先鋭化し、電子スピン双極子相互作用によるスペクトル分裂を solid-state アンサンブル系において観測するためには、 ^{14}N 窒素核由来の電気四重極子相互作用を消失させる必要がある。そのためには、純度の高い ^{15}N 同位体置換した分子スピン系を効率よく合成するルートを開発することが重要なステップである。本研究で

開発された分子スピンはほぼすべて、物質群としても新規な開殻分子、または結晶構造が解明されたジケトンである。下記の biradical は分子の点群としては反転対称構造をもたないのに、弱交換相互作用、及び窒素核上の超微細相互作用と競合する電子スピンの磁気双極子相互作用をもたせた、genuine g-tensor engineering を施した分子スピンの系である。

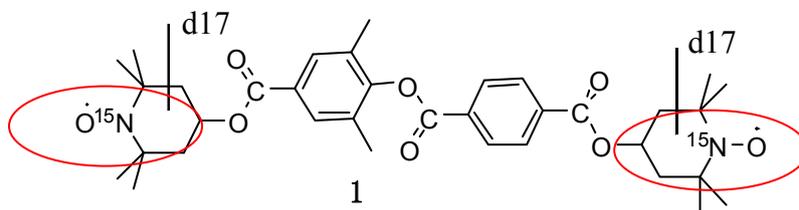


図 2-2-5. genuine g-engineering で分子設計し、新規に合成した 2-electron qubit 系分子の分子構造。

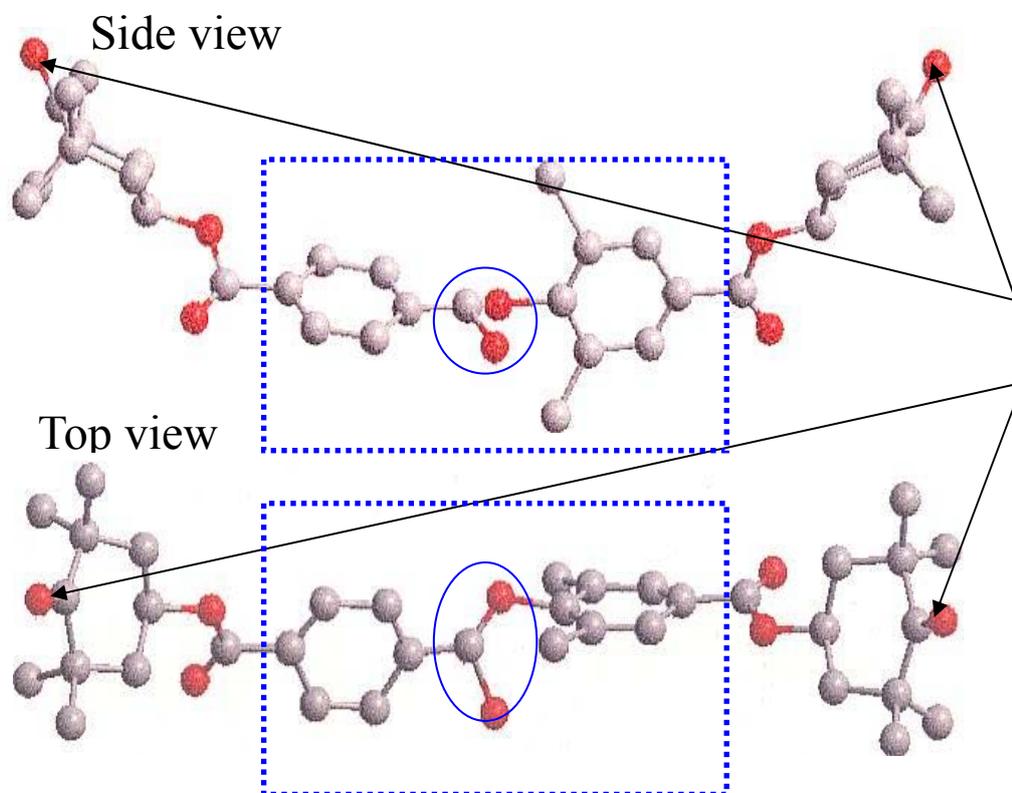


図 2-2-6. 対応する two-electron spin-qubit を望む濃度で宿主格子内に取り込む、第 3 世代の宿主ジケトン(1a: 図 2-1-3 参照)。交換相互作用は、極めて小さく、電子スピンの磁気双極子相互作用の 100 分の 1 程度である。結晶構造の対称性、及び分子スピンの分子構造上、宿主格子中には、磁気的に区別できる分子スピンは、1 種類存在する(下図 2-2-7)。

図 2-2-6 において、赤丸で示す電子スピンのサイト(TEMPO)は、相互に大きく異なる g-tensor で特徴付けられていることが、図 2-2-6 から分かる。図中、4 本の矢印で示す赤小球は、反磁性宿主分子の C=O サイトの酸素原子を示す。中央楕円(または円)で示すリンカーブリッジの中央部は、カルボキシル基(COO)である。カルボキシル基を挟む二つのフェニレン環(ベンゼン環)の二面角は 80 度に及ぶ。この two-electron spin-qubit は、合成的には第 3 世代に属し、高度に分子設計された分子スピンの取り込む理想的な宿主系で

ある。

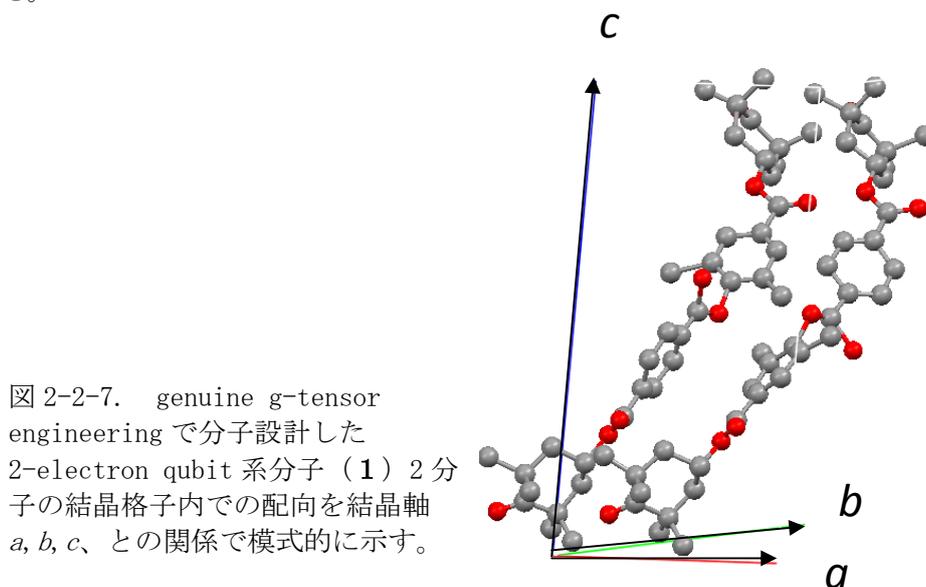


図 2-2-7. genuine g-tensor engineering で分子設計した 2-electron qubit 系分子 (1) 2 分子の結晶格子内での配向を結晶軸 a, b, c 、との関係で模式的に示す。

図 2-2-6 に示す反磁性ホスト格子中に 500 分の 1 の比で取り込まれた、2-electron spin-qubit 系 (1) (図 2-2-5 参照) では、電子スピン間に働く双極子相互作用テンソルは、線幅との競合のために通常の磁気共鳴の手法では分解できないので、Qバンド 4-パルス ELDOR によって全解析した (図 2-2-8 参照)。

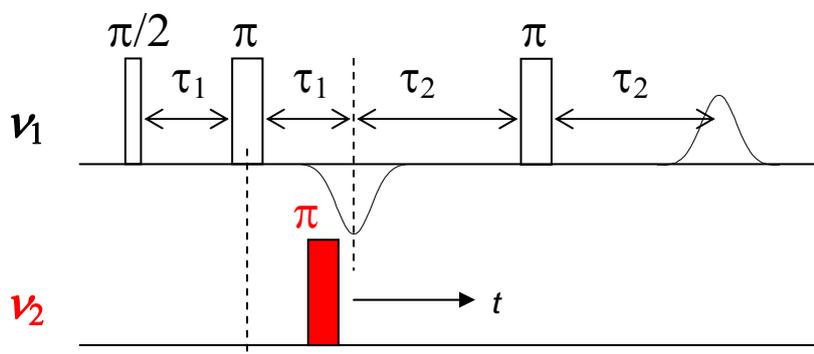


図 2-2-8. 分子スピン系 1 の電子スピン間磁気双極子相互作用テンソルを実験的に決めた、4-パルス ELDOR のパルス系列。

Biradical 1 の磁気的パラメータは、電子スピン間の磁気的双極子相互作用の大きさを表す微細構造定数 $D = -12.3$ MHz、 $E = 0.03$ MHz、交換相互作用 $J = -0.09$ MHz であった。これらの値は、分子スピン 1 の量子化学的な電子構造の描像をよく反映している。これらを含むすべての磁気的テンソルを用いて、電子スピンと核スピン状態を同定できる。電子スピン双極子相互作用と競合する、超微細相互作用を有する窒素核が複数介在しているために、CNOTゲート操作に適した、静磁場の配向とスピン状態を探索する必要がある。核スピン由来の競合的な大きさの超微細相互作用が存在する、電子スピン 2-qubit 系では、この探索過程は避けて通れず、NMR分子量子コンピュータとは状況は大いに異なることに注意する必要がある。最もクリーンな、理想的な CNOTゲート操作を実現するには、核スピン由来のすべての磁気的相互作用を消失させる分子設計、及び線幅の先鋭化を実現する設計が重要である。このような分子スピン系として、C-centered biradical 系が候補になる。

図 2-2-9 に、2-electron spin-qubit 系 biradical **1** の詳細なスピン状態解析から、見出した静磁場配向での CNOT ゲート操作の結果を与える。分子スピン **1** では、addressable な電子スピン qubit を、赤色と青色で区別している。図中、中央の超微細分裂・微細構造スペクトルでは、個々の電子スピンサイト (TEMPO) の共鳴磁場は、赤色、青色でそれぞれ区別している。緑色矢印で示す微分吸収線をモニターして得られた π パルス電子スピンニューテーション (Rabi 振動) が明確に観測されている (bottom, right)。このニューテーションは、solid-state アンサンブル系の分子スピンの電子スピン qubit を使って実現した最初の CNOT ゲート操作である。

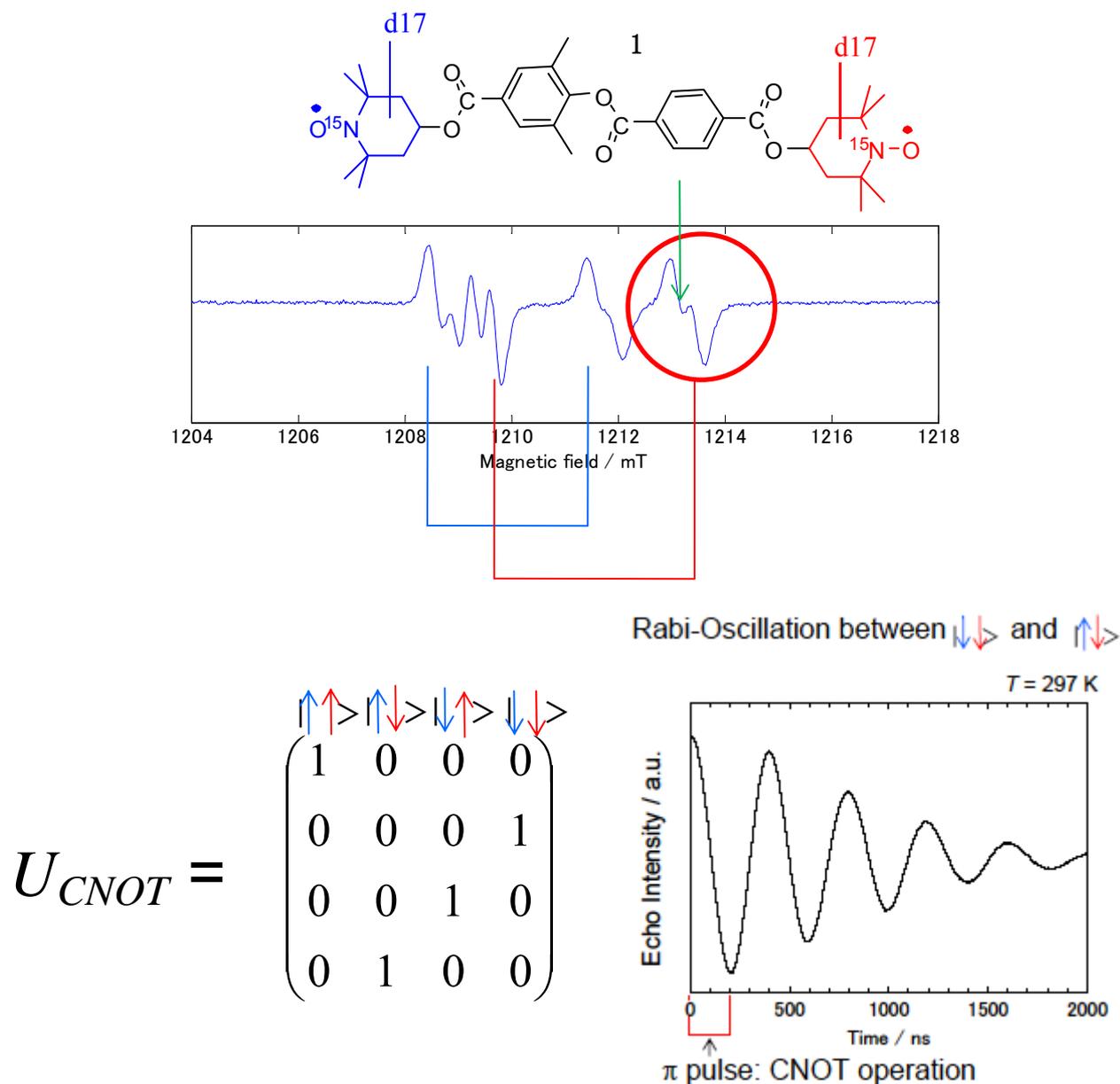
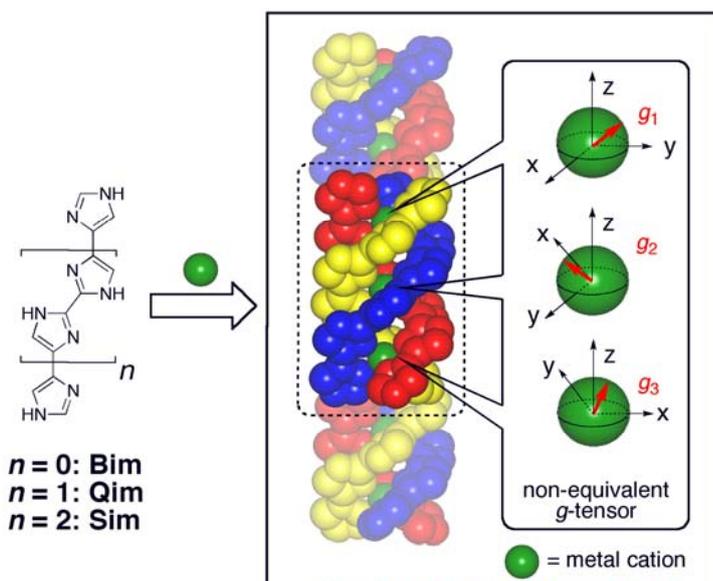


図 2-2-9. 分子スピンの電子スピン 2-qubit 系で観測された最初の CNOT ゲートをしめす Rabi 振動 (下図、右)。

2-3. 最終年度までに、synthetic matter spin-qubit の利点を活かした scalable な電子スピン系を設計・合成し、この課題に対する研究の端緒を開拓すること：

scalable qubits の構築は、量子コンピュータの実現を目指すすべての qubits が直面する共通の難題である。これを解決するアプローチとして、Seth Lloyd は addressable な莫大な数の量子ビットを準備する代わりに、spin qubit 周期系の 1 次元鎖モデルを早い時期に提案したことは有名である (S. Lloyd, *Science*, **261**, 1569-1571 (1993); S. Lloyd, *Sci. Am.* **73**, 140-145 (1995).)。河野・山下・北川らは、この Lloyd モデルを量子コンピュータに実装する量子回路を発表し、1 次元鎖モデルである(ABC) n 系に対してはそれぞれの量子ビットを操る 16 種類のパルス共鳴周波数を用意するだけで、計算時間が n の 1 次でしか大きくなり、従って、量子計算の古典計算に対する指数的スピードアップを阻害しないことを示した (Y. Kawano, S. Yamashita, M. Kitagawa, *Phys. Rev. A* **72**, 012301 (2005).)。しかしながら、この有用な Lloyd モデルを検証する spin qubit 系が物質系 (matter spin-qubits) として具体的に提案され、実際に合成されたことは、これまでない。

一方、すでに述べたように、分子の電子スピンを qubit とする実験的な試みは、量子情報処理技術の研究分野では最も遅く登場したが、電子スピン qubit にもつ分子スピン系は上記の共通の課題を克服するアプローチとして注目されてきた。電子スピン qubit 系の ABC を addressable に識別するには、A、B、C に属する電子の g テンソルを異なるように設計することが必須であるが (g-tensor engineering)、今回、三重螺旋対称構造を巧みに利用して超分子化学的に設計した metallo-helicates (金属イオンを内包するヘリックス構造をもつ錯体分子、図 2-3-1 参照) を初めて合成・単離し、g-tensor engineering が実現していることを、X 線構造解析及び電子スピン共鳴法によって証明した。



三重螺旋対称性を利用して、電子スピンをもつ金属イオンの周りの対称性を制御する、g-tensor engineering アプローチ

図 2-3-1. オリゴイミダゾール(Bim, Qim, Sim)を配位子とする、三重螺旋対称構造をもつ、Lloyd モデルの電子スピン qubit 版。

三重螺旋対称性の起源によって、不對電子をもつ金属陽イオンの g-tensors がすべて異なるだけでなく、螺旋構造が強いために螺旋の巻く向き (chirality) が異なる光学活性分子を単離でき、それぞれ左右円偏光への応答が異なる。

(2)研究成果の今後期待される効果

本 CREST の研究課題については、分子スピン 2, 3-qubit 系の合成、Q-バンドマイクロ波パルス技術の開拓による基本量子ゲート操作の実行を実現できたことにより、当初の目

標を達成できた。分子設計によっては、solid-state 系においてデコヒーレンス時間の長い分子スピン系が実現される可能性もあり、ここで得られた成果は、電子スピン qubit 間の幾何学的配列構造を制御する設計指針にも寄与できる。

また、Scalable qubits の構築の課題は、今日すべての qubit の候補が直面している問題であるが、分子スピンが本来的に tailor-made 的に設計・合成できる利点を活かして、Lloyd モデルの電子スピン qubit version のプロトタイプを構築することができることを示した。ここでは、3 つの異なる電子スピンの g-tensors を、群論的な三重螺旋対称性を利用して作り上げるアプローチを採用したが、開殻金属イオンの g-tensor の局所的な制御と全体としての構造の robustness は、超分子化学的な結合様式に依存している。金属イオン超分子系で得られた知識は、今後、マイクロ波パルス技術の時間分解能が先行して改善されるに従い、交換相互作用を制御したポルフィリン骨格など、2次元分子フレームを利用した平面分子スピン配列(開殻金属イオンを含む)が登場してくる時の tailor-made 型の分子設計に役立つと思われる。

DNAバックボーン内の相補的水素結合を直接活用した、分子スピン electron spin-qubits の構築では、DNA2重螺旋内に分子スピンを結合させることにより、有効な g-tensor engineering が可能となる[文献:66. K. Maekawa, S. Nakazawa, H. Atsumi, D. Shiomi, K. Sato, M. Kitagawa, T. Takui, and K. Nakatani, *Chem. Commun.*, **46**, 1247-1249 (2010). 69. H. Atsumi, K. Maekawa, S. Nakazawa, D. Shiomi, K. Sato, M. Kitagawa, T. Takui, and K. Nakatani, *Chem. Lett.*, **39**, 556-557 (2010).] この場合、結合サイトや結合様式によって、溶液系でも特異な異方的な運動を反映した超微細構造スペクトルが出現する。従って、ニトロキシドラジカルをプローブとして、2重螺旋の対称性と局所的な結合(ミスマッチなど)が寄与していることがシミュレーションから明らかにすることができる可能性がある。これが分かれば、電子スピンのリソースを金属イオンに依存しない、Lloyd モデル系を設計する上で、DNA バックボーン内に、どのように複数個の分子スピン系を水素結合を使って配向させることができるかの指針を得ることができると期待される。

4.3 フォールトトレラント量子計算(名古屋大学 小澤グループ)

(1)研究実施内容及び成果

3-1 量子計算素子の誤り確率に関する一般理論の展開

スケーラブルな量子計算の実現可能性を論じるにあたって、必要な物理的リソースの評価は重要な論点である。本研究では、高精度の基本的量子計算素子の実現を阻む不可避免的な量子雑音の性質を、特に、物理的リソースとの定量的なトレードオフの観点から、解明する事を目的とする。

量子計算量理論の基本仮説は、基本的量子計算素子がユニタリ作用素として実現されるということである。しかし、Shor のアルゴリズム発見直後から、デコヒーレンスによりユニタリな計算素子の実現が阻まれると指摘され、累積誤差のため計算の複雑さに応じて基本素子の実装に限りなく高い精度が要求されるので、スケーラブルな量子計算の実現が不可能であると予想された。

これに対して、誤り耐性量子計算理論のその後の発展によって、要素誤差が一定の閾値をクリアすれば、連鎖的量子誤り訂正によってスケーラブルな量子計算が原理的に可能であること(閾値定理)が示された。このことによって、スケーラブルな量子計算の実現可能性の問題は、デコヒーレンスによる誤差が理論的閾値をクリアできるか否かという問題に帰着された。一方、デコヒーレンスには、環境へのエネルギー散逸に由来する静的なもの、測定装置や計算素子において制御系との不可避な相互作用に由来する動的なものが存在する。前者は、環境の改善とデコヒーレンス時間の長い材料を利用することにより「相互作用を抑制する」ことで原理的に克服されると考えられているが、後者は、制御系との「相互作用を抑制する」ことでは克服できないというジレンマがあり、そのジレンマの解明が課題となった。

この問題に対して、van Enk、Kimble、Gea-Banacloche らは原子系量子ビットと電磁場の相互作用で量子ビットを制御する Jaynes-Cummings モデルにおいて、電磁場の量子揺らぎから不可避なデコヒーレンスが現れることを明らかにし、誤差が制御場の平均光子数に反比例すること、誤差の大きさは前述の閾値定理で要求される精度に匹敵するものであることが導かれた。これに対して、Itano は結論がモデルの選び方に依存していると批判し、論争が起こった。

本研究では、この論争の解決を一つの目標として、制御系との相互作用に由来するデコヒーレンスの機序とそれによる精度限界を明らかにするためのモデルに依存しない研究方法を確立した。量子計算機が環境から独立した装置であるためには、計算機の平行移動や回転、時間のずらしなど基本的な変換に計算結果が不変であるという特質を有する必要がある。そのため、量子ビットと制御系の相互作用は様々な保存法則を満たしている。このことに着目して、制御相互作用のモデルを仮定しないで、相互作用が満たす保存法則だけを仮定して、そこから不可避な誤差を導く方法を確立することを研究課題とした。この研究方法によって前述の van Enk、Kimble、Gea-Banacloche らの結果を再現することができれば、もはやその結論がモデルの選び方に依存しているという批判を受けることはなくなる。

このような方法が可能であるという着想は、量子測定理論で古くから知られている Wigner-Araki-Yanase の定理から得られた。1960年に証明されたこの定理では、測定相互作用の加法的保存量と非可換な物理量の正確な測定が不可能なことが示され、その誤差は測定装置のサイズ(保存量の分散)に反比例することが示唆された。

この定理が不確定性原理から得られるのではないかという予想があったが、従来の理解からは、保存量が全く変化しない(擾乱を受けない)測定では、それと非可換な物理量の誤差が発散するという矛盾する結論しか得られなかった。しかし、いわゆる小澤の不等式の発見によって、全く擾乱を受けない測定の誤差は発散するのではなく、擾乱を受けない物理量の初期状態の揺らぎに反比例するという事実が解明された。この関係式から Wigner-Araki-Yanase の定理を定量的に明らかにする新たな不等式(Wigner-Araki-Yanase の定理の定量化公式)が直ちに導かれる。

この定量化公式が端緒となって、まず、測定相互作用と共通点のある制御NOTゲートの精度限界の研究が始められ、保存法則を満たす制御NOTゲートの実装における不可避な誤差を表す公式が得られた。引き続いて、Hadamard ゲートの実装における誤差公式が得られた。これらの成果が、2002年から2004年にかけて得られ、2005年開始の本研究計画の機は熟していた。

2005年には、Gea-Banacloche との共同研究で Hadamard ゲート実装における誤差公式を Jaynes-Cummings モデルに適用して、保存則だけから得られた結論とモデルの解析からえられた結論とを比較して、エネルギー保存測から導かれた誤差は、ちょうど電磁場の位相揺らぎから導かれた誤差と同等であることが明らかにされた。このことにより、Itano 等の批判にも関わらず、van Enk、Kimble、Gea-Banacloche らの結果の正当性が明らかになった。

2006年には、同氏との共同研究で多くのゲートの制御を一つのパルスで共有することができないことが示された。これまでの研究で、コヒーレント状態における電磁場によって制御される1量子ビット上の量子演算の誤り確率はその平均光子数に反比例することが明らかにされたが、N量子ビット上に同一の量子演算を同一の誤り確率で行なう場合には、平均光子数をN倍にする必要があることを示した。従って、一定の誤り確率で多くの量子演算を行なうための最小のエネルギーは、それらの演算ゲートにおいて共有することができないことが結論される。

以上の研究では、不確定性原理を利用するため、精度限界はゲート忠実度の上限で与えられていたが、この研究方法を NOT ゲートに適用すると、誤差限界が得られないという問題があった。この問題を解決するため唐澤時代を中心にトレース距離に基づく新しい研究方法を開発し、2007年に、計算基底と直交するスピン成分の保存法則のもとで n 量子ビットのサイズを持つ制御系で NOT ゲートを実装すると不可避な誤り確率が $(1/2)\{1-\cos[2\pi/(n+4)]\}$ 程度であることが得られた。

これまでの研究で、スピン量子ビット上の Hadamard ゲートを角運動量保存法則のもとで実装する場合のゲート非忠実度(1からゲート忠実度の2乗を引いた値)の一般的な下限が、不確定性原理から得られ、また、トレース距離に関する考察で NOT ゲートの誤差確率の下限が得られた。

次に取りかかった課題は、これらの研究方法を用いて、任意の保存法則のもとで任意の1量子ビットゲートの実装における精度限界を明らかにすることであった。この研究により、任意のユニタリゲート U_S を任意の加法的保存量 L_S+L の存在のもとで実装すると、実装されたゲートのユニタリゲート U_S に対する非忠実度が、

$$B = \sin^2(\theta/2) \sin^2\Psi (1 - \sin^2(\theta/2) \sin^2\Psi) / (1 + \sigma(L/c)^2)$$

以上であることが得られた。ここに、 L_S は量子ビット系の保存量、 L は制御系の保存量、 Ψ は L_S が生成する Bloch 球の回転軸と U_S が生成する回転軸との相対角、 θ は U_S が生成する Bloch 球の回転角 (U_S の固有値の偏角の差)、 c は L_S の任意の状態における標準偏差の最大値 (L_S の固有値の差の絶対値の $1/2$) を表す。一方、 L_S の回転軸を U_S の回転軸の周りに θ 回転させた軸と回転させる前の L_S の回転軸との間の角を 2γ とすると、この値は、 $B = \sin^2 2\gamma / (4 + 4\sigma(L/c)^2)$ と表すこともできる。

U_S の固有値が ± 1 、すなわち U_S が自己共役の場合は、 $\theta = \pi$ なので、 $B = \sin^2 2\Psi / (4 + 4\sigma(L/c)^2)$ が得られる。この結果により、スピン $1/2$ の量子ビット上の任意のユニタリゲートをスピン $N/2$ 系の制御系との回転不変な(つまり、全ての Ψ について保存測が成り立つ)相互作用で実装する場合に、 $0 \leq \theta \leq \pi/2$ の場合に非忠実度が $\sin^2 \theta / (4 + 4N^2)$ 以上になり、 $\pi/2 \leq \theta \leq \pi$ の場合に非忠実度が $1 / (4 + 4N^2)$ 以上になることが示された。アダマールゲートや NOT ゲートは $\theta = \pi$ の場合で、これらに対しては、非忠実度が $1 / (4 + 4N^2)$ 以上になる。これにより、全ての1量子ビットゲートに対して、角運動量の保存法則から、アンシラのスピン量子数の2乗に反比例するゲート実装の不可避な誤差が導かれることが明らかになった。つまり、これらの誤差が生まれる機序は具体的な相互作用のモデルによるのではなく、一般的に成立する保存法則に基づくものでモデルや実装の変更には左右されない根本的な制約であることが明らかにされた。

また、2準位原子と単一モード電磁場の相互作用のように Jaynes-Cummings モデルで記述される場合は、 $L_S = \sigma_z$ 、 $L = 2a^\dagger a$ であり、制御系の状態が平均光子数 n のコヒーレント状態の場合、 $c=1$ 、 $\sigma(L/c)^2 = 4\sigma(a^\dagger a)^2 = 4n$ 、となるので、 $B = \sin^2 2\gamma / (4 + 16n)$ が得られる。ただし、 2γ は、 z 軸を U_S の回転軸の周りに θ 回転させた軸と回転させる前の z 軸との間の角である。デコヒーレンスには様々な要因があり、この限界に直ちに到達できると期待することはできないが、限界が平均光子数に反比例することから同一のエネルギー・リソースのもとでは、振動数の小さい電磁波による制御に優位性があることが結論される。このことは、空洞 QED などの光を用いる制御より、NMR 等の電磁パルス制御の方が同一のエネルギー・リソースで制御の精度に優位性があることになり、量子

情報の多くの応用で光の高周波性が優位性を持つことは対照的である。

3-2 不確定性原理と保存則に由来する量子雑音の研究

Wigner-Araki-Yanase の定理は、測定相互作用に関する加法的保存量が存在する場合、それと非可換な物理量の反復可能で正確な測定は不可能であることを主張している。本研究では、測定装置のメータが反復測定可能であることを仮定して、この定理を乗法的保存量に拡張し、乗法的保存量と非可換な物理量の反復可能とは限らない一般の測定の不可能性を証明した。更に、乗法的保存量が存在する場合の測定における平均2乗誤差の下限を求め、誤差を小さくするためには、加法的保存量の場合には装置系に含まれる保存量の分散を小さくする必要があったが、乗法的保存量の場合には変動係数(標準偏差の平均に対する比)を小さくする必要があることを明らかにした。

量子雑音の尺度の相互関係についての基礎研究のため、量子チャネルに含まれる低雑音パラメータの推定問題を定式化し、その問題におけるエンタングルメントによる Fisher 情報量の増大効果に関する研究を行い、2レベル系の低雑音パラメータ推定において、増大比の上限が $3/2$ であることを証明し、また、いくつかの例において上限を達成する条件を求めた。

量子チャネルに含まれる低雑音パラメータ推定問題の N 体拡張を考察した。一般には、最大の Fisher 情報量を得るためには、入力状態として、 N 体系のエンタングルメントや相関を持つ状態を利用しなければならないが、雑音が十分に小さく、量子チャネルが散逸的ならば、エンタングルメントを利用することなく、分解可能な入力状態において、最大の Fisher 情報量が得られることを示した。従って、このような場合には、最適なパラメータ推定が理論的には比較的容易に行なわれると期待できる。

3-3 アルゴリズムの応用研究

量子コンピュータの性能を十分に引き出すためには、通常のコピー上で動作するアルゴリズムとは異なる、量子コンピュータ専用のアルゴリズム(量子アルゴリズム)を使用しなければならない。量子アルゴリズムとして最も有名なアルゴリズムは、1994年に Shorによって発表された因数分解問題を解く量子アルゴリズムと、同じ論文の中で発表された離散対数問題を解く量子アルゴリズムである。2001年にNatureに発表された論文 [Vandersypen et al.: Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance, Nature 414, pp.883-887 (2001)]では、15 を 3 と 5 に分解する Shor の因数分解アルゴリズムが、分子スピンを用いた7キュービット量子コンピュータ上で実行された。しかし、この論文で実行された量子アルゴリズムで用いられた量子回路は、キュービット数と演算数節約のために入力する問題にあわせて設計されており、16未満の数を因数分解する汎用的な量子回路にはなっていない。そこで、分子スピン量子コンピュータ上で動作する、汎用的で効率的な量子回路の設計方法を研究した。

分子スピン量子コンピュータ上の量子回路は、通常量子回路と異なり、近接キュービット間の相互作用のみを用いて演算を行う。このようなモデルにおける量子回路の実行方法については Lloyd による先駆的研究 [Lloyd: A Potentially Realizable Quantum Computer, Science 17, pp. 1569-1571 (1993)] が知られているが、通常量子回路から分子スピン量子コンピュータ上の量子回路への効率的な変換方法が [Kawano, Yamashita, Kitagawa: Explicit implementation of quantum circuits on a quantum-cellular-automata-like architecture, Physical Review A 72, 012301 (2005)] で示されている。この変換を用いれば、一般量子回路を効率的な分子スピン量子コンピュータ上のアルゴリズムに変換することができるため、効率的な量子回路の設計方法に研究の焦点を絞った。

周期を取り出すために用いられる量子 Fourier 変換は、Shor のアルゴリズムで最も重要な操作である。この量子 Fourier 変換を他の変換と置き替えることにより、Shor のアルゴリズムの拡張が可能である。本研究では、一般化 Pauli 群の正規化群として定義される拡張 Clifford 群に注目し

た。その理由は、(1)拡張 Clifford 群は量子 Fourier 変換を含む集合であり、Shor のアルゴリズムの自然な拡張ができる、(2)Clifford 群は量子エラー訂正符号に用いられるため、研究成果の利用が、新しい量子エラー訂正の設計に応用できる可能性がある、(3)Clifford 群を用いると安全性の高い暗号通信プロトコルを実現できることが知られており、量子計算以外にも応用範囲が広い、などである。

拡張 Clifford 群の任意の要素は高々 2 つの行列の積に分解され、それぞれがさらに、量子 Fourier 変換の拡張と 2 つの対角行列の積に分解できることが知られている。ここで、量子 Fourier 変換の拡張とは、通常の量子 Fourier 変換を実行する量子回路において、制御回転ゲートの回転角を適当な値だけ奇数倍したものである。なお、通常の量子 Fourier 変換では、この奇数倍部分が 1、両側から掛ける対角行列が単位行列となっている。量子 Fourier 変換の拡張部分は制御回転ゲートの回転角を制御すればよく、対角行列部分は回転ゲートと制御回転ゲートの積に分解することができる。このことから、拡張 Clifford 群の任意の元を、量子回路によって効率的に実行可能なことが証明できる。

次に、拡張 Clifford 群を用いた量子アルゴリズムの設計を考えるため、既存の量子アルゴリズムの構成方法を拡張 Clifford 群の立場から考察した。拡張 Clifford 群は一般化 Pauli 群の正規化群なので、共役な元で両側から挟むことにより、一般化 Pauli 群の元を別の一般化 Pauli 群の元に変換することができる。量子 Fourier 変換を用いた位相推定と同じ方法により、ユニタリ変換と固有状態を与えられると、その固有値の位相分だけ z 軸周りを回転する量子操作を実行することができる。この操作は一般化 Pauli 群の元とみなされるので、適当な拡張 Clifford 群の元を用いて、x 軸周りで回転する量子操作に変換することができるはずである。実際に、この拡張 Clifford 群の元として量子 Fourier 変換を選んだものが Shor の因数分解を解くアルゴリズムである。一方、Shor の離散対数問題を解くアルゴリズムは、基本的な発想は変わらないが、問題に含まれる変数が増加するため、2 組の量子 Fourier 変換が必要となる。その結果、因数分解よりも多くのキュービットが必要になる。

Shor の離散対数問題を解くアルゴリズムを改良し、拡張 Clifford 群を用いる以下のような量子アルゴリズムを新たに提案した。前出の方法では z 軸周りを回転する一般化 Clifford 群の元を量子 Fourier 変換を用いて x 軸周りの回転に変換した。この回転角の中に、補助ビットが複数の量子状態の重ねあわせとなることから発生する不定値が入り込んでいる。そのため、不定値を消去するために、別の量子 Fourier 変換を用いて不定値を取り出し、はじめに得られた答えと組み合わせで連分数展開をすることにより、この不定値を消去する。この操作は量子 Fourier 変換を使う場合は不可避であり、キュービット数が増える原因となっている。しかし、両側から挟む拡張 Clifford 群の元として、不定数の逆数を要素として含み、両側から挟んだ結果、不定数同士が掛け算され消去されるものを選べば、キュービット数を増やして不定数を取り出す操作を回避することができる。その結果、提案アルゴリズムでは、Shor のアルゴリズムに比べて少ないキュービット数で離散対数問題を解くことができる。

提案した量子アルゴリズムは、Shor の離散対数問題に対するアルゴリズムと比較すると、最大で 3 分の 2 程度までキュービット数を削減できる。通常のコンピュータ上でこのアルゴリズムをシミュレーションすると、15 キュービット量子コンピュータ上で $6^t \equiv 152 \pmod{173}$ の解 32 が確率 70% で得られる。また、同じキュービット数の量子コンピュータ上で $8^t \equiv 100 \pmod{103}$ の解 3 が確率 60% で得られる。このように提案アルゴリズムの特徴は、高い確率で正解が得られ、Shor のアルゴリズムのように得られた値をさらに計算して答えを求める必要がない点にある。もっとキュービット数が少ない例としては、8 キュービット量子コンピュータ上で $3^t \equiv 5 \pmod{11}$ の解 3 を計算する問題が挙げられる。この問題の場合、一度の量子計算で正解が得られる確率は 50% となる。このように、提案アルゴリズムはキュービット数を削減していくと正解が得られる確率が低下し、キュービット数を増やすと正解が得られる確率が 100% に近づいていく。提案アルゴリズムを用いて答えを得る場合、最低でも 8 キュービット程度必要である。それより小さな量子コンピュータでは、正解を出力する確率と不正解を出力する確率が同じくらいになってしまうためである。

Shor のアルゴリズムの改良研究としては、[Proos, Zalka : Shor's Discrete Logarithm Quantum Algorithm for Elliptic Curves, Quantum Information and Computation,

pp.317-344 (2003)] がよく知られている。この論文では、Shor のアルゴリズムの量子 Fourier 変換部分を分解して少ないキュービット数で離散対数問題を解くアルゴリズムが示されている。提案アルゴリズムに比べて、このアルゴリズムの方がキュービット数も演算数も少なく抑えることができる。ただし、Proos-Zalka のアルゴリズムは、Shor のアルゴリズムと同様に、古典計算による後処理が必要である。それに対して、提案アルゴリズムではそのような後処理が必要なく、答えが直接得られる。

3-4 量子雑音理論の量子暗号への応用

普遍的な不確定性原理(小澤の不等式)によって、非可換な物理量の測定誤差と擾乱の普遍的限界が明らかにされ、エンタングルメントを利用して、非可換な物理量を乱さないで正確な測定ができる可能性が明らかにされ、これまで不可能と考えられた新しい測定法の可能性を広げた。一方、量子暗号への応用では、盗聴者の測定には制約があり、そのような一般的な可能性は妨げられていると考えられる。このことを明らかにするために、非可換な物理量を同時測定できる場合を数学的に特徴付けて、エンタングルメントが利用できない場合には、そのような可能性がないことを明らかにした。

3-5 成果の位置づけ

本研究は、スケーラブルな量子計算実現の困難を個別のモデル解析に頼らずに基礎物理に立ち帰って本格的に究明するという目的を持った希少な研究であり、Heisenberg の不確定性原理の再定式化という歴史的な構想に基礎づけられ、数学的方法を用いた研究方法の厳密さと成果の一般性において他の研究グループの追従を許さない。関連する研究としては、DFS による誤り訂正があるが、これは環境との受動的相互作用に対するもので、制御系の特有な相互作用を対象とした研究は、これまでなかった。また、本グループの研究推進後、量子情報における保存則及び超選択則の研究が盛んになったが、量子暗号を主な対象としている。量子計算実現を対象としたものは、本研究に限られる。一連の研究成果の重要性は、国際会議の招待講演、新聞、雑誌報道、受賞実績などから明らかである。

(2)研究成果の今後期待される効果

本研究では、Heisenberg の不確定性原理の再定式化という歴史的な構想に基礎づけられ、量子計算、量子測定の精度の限界を制御に使われる相互作用が従う保存法則だけから明らかにするという画期的な研究方法を確立した。量子情報技術だけでなく、量子物理学全般に広く応用される基礎理論として今後の展開が見込まれる。

4.4 超伝導量子回路における量子状態制御(理化学研究所 中村グループ)

(1)研究実施内容及び成果

本研究では、巨視的な人工スピンあるいは少数準位原子とも言うべき超伝導磁束量子ビットを中心に高精度な量子状態制御および読み出しを実現することを目指してきた。散逸の小さい超伝導量子回路中には、量子ビットだけでなく、線形あるいは非線形の共振器また伝送線路も容易に実現される。巨大な双極子モーメントを持つ人工原子としての超伝導量子ビットとこれらの電磁場モードとの組み合わせにより、マイクロ波帯域の量子光学実験を基板上で実現することを試みた。超伝導量子ビットを2つあるいは3つのエネルギー準位を持つ人工原子として用い、これを超伝導共振回路や超伝導伝送線路と強く結合させた場合に起こる量子光学的効果を調べた。

Sherbrooke 大学との共同研究では、磁束量子ビットと超伝導共振器の相互作用を理論的に検討し、原子と共振器の間の結合強度が共振器の共振周波数と同じオーダーに達する「超」強結合領域の実現の可能性を見出した(Bourassa et al. PRA2009)。従来の原子などを用いた量子光学実験では到達の困難であった現象の実現が期待される。

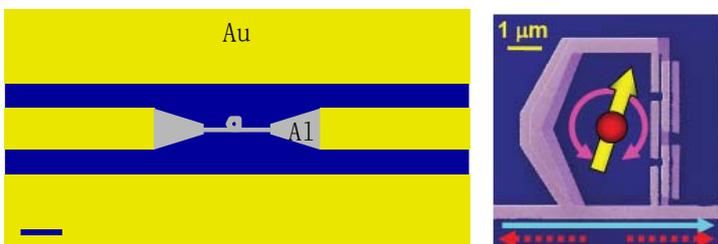


図4-1. マイクロ波伝送線路と結合した磁束量子ビット。右は磁束量子ビット部分の拡大図。

一方、実験では磁束量子ビットを1次元の超伝導マイクロ波平面型伝送線路と強く結合し(図4-1)、共鳴蛍光の観測を行った。1次元に閉じ込められた伝播モードの特徴を活かして入射モードと反射モードの完全なマッチングを実現し、伝播光と吸収・再放出光との破壊的干渉効果により、透過マイクロ波の消光比94%を得た。また非弾性散乱光の観測により Mollow 三重

項の観測に成功した(Astafiev et al. Science2010)(図4-2)。さらに人工原子の第3のエネルギー準位を利用することで、Autler-Townes 二重項に起因する電磁誘起透過現象や(Abdulmalikov et al. PRL2010)、マイクロ波励起を用いた反転分布の生成によるプローブマイクロ波の増幅効果を観測した(Astafiev et al. PRL2010)(図3)。これらの一連の実験は、人工原子としての超伝導量子ビットが、1次元伝送線路を伝播するマイクロ波光子とコヒーレントに相互作用することを示し、マイクロ波フォトニック回路における重要な要素となりうることを示したものである。通常、開放空間への光子の自発放出は超伝導量子ビットのデコヒーレンス要因とみなされるが、上記の散乱問題においてはあくまでコヒーレントな過程の一部とみなされることが興味深い。人工原子から1次元モードへのエネルギー緩和率が、他のチャンネルへの緩和率および位相緩和率よりもずっと大きい状況が実現している。原子と1次元電磁場モードとが、共振器の助けを借りることなく、このように強く結合している状況は他の物理系ではまだ実現されていない。最近では、連続マイクロ波ではなく、パルスマイクロ波を用いた実験において、時間領域におけるダイナミクスも測定している。人工原子の自発放出において原子のコヒーレンスが光子へと転写される様子が確認された。観測結果から量子 regression 定理を用いて光子場の2時間相関関数(のフーリエ変換)を計算し、周波数領域における Mollow 三重項の観測との一致を見た(投稿準備中)。

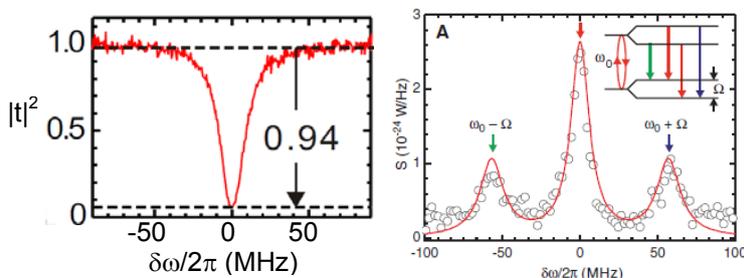


図4-2. 共鳴蛍光。(左) 共鳴周波数における透過光の抑制。(右) 非弾性散乱スペクトルにおいて観測された Mollow 三重項。

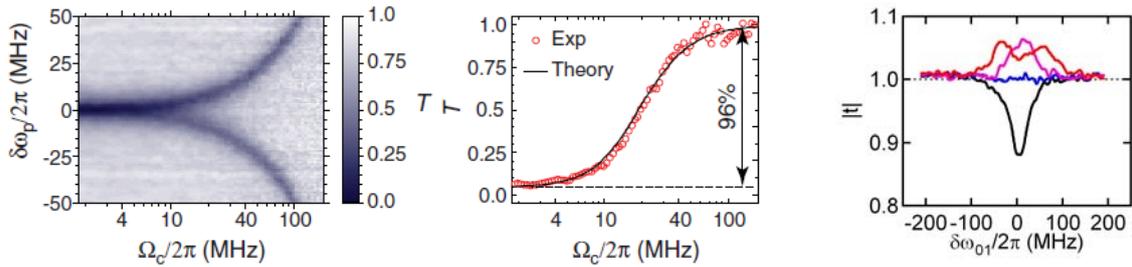


図4-3. 人工3準位系を用いた実験。(左) Autler-Townes 二重項の分裂。(中) 共鳴周波数におけるプローブ光透過強度のポンプ強度依存性。(右) ポンプ光により生成された反転分布の引き起こす誘導放出によるプローブ光の増幅。透過係数が1より大きくなりゲインが得られている。

これらの結果と関連して、東京医科歯科大学と共同で、1次元モード上を伝播する光子を用いた量子ビット間の決定論的 $\sqrt{\text{SWAP}}$ ゲートを実現する方法を提案した(Koshino et al. PRA2010) (図4-4)。この提案では Λ 型3準位系が入射する光子量子ビット列を反射する際に光子間にエンタングルメントを生成するものであり、3準位原子は初期化も制御も観測も必要とせず完全に受動的に使用されるところが新しく優れた点である。上記の実験でも重要な役割を果たした入射光と原子による再放出光との干渉効果が鍵となっている。この提案では偏光依存した遷移の選択捉を利用しているため、今のところ超伝導量子ビットではなく、量子ドット中の荷電励起子などを用いた方が実現しやすいと考えられるが、超伝導量子ビットへの応用も検討中である。

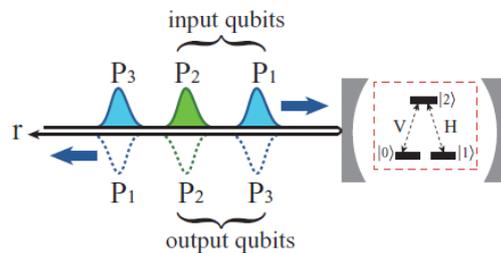


図4-4. 決定論的光子-光子エンタングルゲート。

駆動された超伝導非線形共振器を用いた磁束量子ビットの非破壊単一事象読み出しにも取り組んでいる。これまでのところ、非線形共振器に磁氣的に結合した磁束量子ビットの読み出しを試みてきて、読み出し効率 $\sim 20\%$ 、非破壊性 $\sim 50\%$ の値を得ている。特性が改善されない原因として、読み出し時に磁束量子ビットが磁氣的に揺すられることになり、その大きい後方作用が量子ビットの状態を乱していることが考えられる。現在、磁束量子ビットと非線形共振器とを静電的に結合することにより、この問題を解決することを目指している。

超伝導量子ビットおよび超伝導共振器におけるより高度な量子状態制御を目指すにあたり、デコヒーレンス時間の改善は避けて通れない課題である。デコヒーレンス過程としては主にエネルギー緩和と位相緩和が挙げられるが、それぞれの原因についてまだ理解されていないことが多い。

磁束量子ビットにおける位相緩和は主に低周波数領域における磁束の $1/f$ 雑音によるものであることを以前に明らかにしている。その揺らぎの起源が局所的なものなのか大局的なものなのかを調べるために、2つの隣接し相互作用する磁束量子ビットの位相緩和率を測定することにより、それぞれに加わる磁束揺らぎの相関を調べた。その結果、大局的な揺らぎの場合に期待されるような相関は見られず、磁束揺らぎが局所的な性質を持つことを明らかにした(Yoshihara et al. PRB2010)。磁束揺らぎが超伝導電極表面に局在する多数の電子スピンに由来するという提案が最近なされているが、それと矛盾しない結果である。

磁束量子ビットのエネルギー緩和率に関しては通常 $1 \mu\text{s}$ 程度の値が得られているが、試料依存性も大きく、何がその限界を決めているのかまだ見極めがついていない。その中で、最近 $T_1 = 11.5 \mu\text{s}$ 程度のエネルギー緩和時間を持つ試料を得て、MIT のグループと共同で詳細な実験を行なっている。磁束揺らぎによる位相緩和の影響が最小になる磁束バイアス条件で、スピンエコー

測定において T_1 の 2 倍に相当する $23 \mu\text{s}$ の位相緩和時間を観測し、これまでのあらゆる超伝導量子ビット実験における最長記録を更新した。この試料を用いて高精度の量子ビット制御を実証する実験を進めている。

(2)研究成果の今後期待される効果

マイクロ波領域における量子光学の研究は、人工原子と電磁場モードの強い結合とジョセフソン接合回路の持つ強い非線形性を活かして、さらに新しい現象を見出していくものと期待される。

伝送線路に強く結合した超伝導人工原子は、これまでに実現されていないマイクロ波帯域における単一光子検出器として、量子情報処理や天文学のためのセンサーとして役立つ可能性もある。

非線形共振器を用いた読み出し回路はパラメトリック増幅器としても利用でき、標準量子限界以下の電磁場やスピンの揺らぎの測定に役立つことが期待される。

エピタキシャル接合を用いた量子ビットによりデコヒーレンスの問題が大きく改善されることを期待している。

§ 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 0件、国際(欧文)誌 101件)

【北川 G】

1. R. Rahimi, K. Takeda, M. Ozawa, M. Kitagawa, “Entanglement witness derived from NMR superdense coding”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 2151-2159 (2006).
2. A. SaiToh, and M. Kitagawa, “Matrix-product-state simulation of an extended Brüschweiler bulk-ensemble database search”, *Phys. Rev. A* **73**, 062303 (2006).
3. A. SaiToh, R. Rahimi, “Population-only decay map for n-qubit n-partite inseparability detection”, *Phys. Rev. A* **74**, 064305 (2006).
4. K. Takeda, “A highly integrated FPGA-based nuclear magnetic resonance spectrometer,” *Rev. Sci. Instrum.* **78**, 033103 (2007).
5. R. Rahimi, A. SaiToh, M. Nakahara, and M. Kitagawa, “Single-experiment-detectable multipartite entanglement witness for ensemble quantum computing”, *Phys. Rev. A* **75**, 032317 (2007).
6. W. K. Peng, K. Takeda, “Efficient cross polarization with simultaneous adiabatic frequency sweep on the source and target channels”, *J. Magn. Reson.* **188**, 267-274 (2007).
7. M. Inukai, K. Takeda, “Studies on multiple-quantum magic-angle-spinning NMR of half-integer quadrupolar nuclei under strong rf pulses with a microcoil”, *Concepts in Magn. Reson.* **33B**, 115-123 (2008).
8. W. K. Peng, A. Samoson, M. Kitagawa, “Simultaneous adiabatic spin-locking cross polarization in solid-state NMR of paramagnetic complexes”, *Chem. Phys. Lett.* **460**, 531-535 (2008).
9. K. Takeda, Y. Tabuchi, M. Negoro, M. Kitagawa, “Active compensation of rf-pulse transients”, *J. Magn. Reson.* **197**, 242-244 (2009).
10. A. Kagawa, Y. Murokawa, K. Takeda, M. Kitagawa, “Optimization of ^1H spin density for dynamic nuclear polarization using photo-excited triplet electron spins”, *J. Magn. Reson.* **197**, 9–13 (2009).
11. A. Kagawa, M. Negoro, K. Takeda, and M. Kitagawa, “Magnetic field cycling instrumentation for dynamic nuclear polarization-nuclear magnetic resonance using photoexcited triplets”, *Rev. Sci. Instrum.* **80**, 044705 (2009).
12. Yutaka Tabuchi, Makoto Negoro, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, “Total compensation of pulse transients inside a resonator”, *J. Magn. Reson.* **204**, 2, 327-32 (2010)
13. M. Negoro, K. Tateishi, A. Kagawa, K. Takeda, M. Kitagawa, “ ^2H -decoupling-accelerated ^1H spin diffusion in dynamic nuclear polarization with photoexcited triplet electrons”, *J. Chem. Phys.* **133**, 155504 (2010)

【工位 G】

14. R. Rahimi, K. Sato, K. Furukawa, K. Toyota, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa, and T. Takui, “Pulsed ENDOR-based Quantum Information Processing”, *Int. J. Quant. Info.* **3**, 197-204 (2005).

15. R. T. Hamazawa, T. Nishioka, I. Kinoshita, T. Takui, R. Santo, A. Ichimura, "Thiacalix[3]pyridine produces a stable mononuclear rhodium(II) complex with mutual Jahn-Teller effect", *Dalton Trans.*, 1374-1376 (2006).
16. K. Maekawa, D. Shiomi, T. Ise, K. Sato, and T. Takui, "Experimental evidence for the triplet-like spin state appearing in ground-state singlet biradicals as a key feature for generalized ferrimagnetic spin alignment", *J. Phys. Chem. B* **110**, 2102-2107 (2006).
17. T. Sasamori, E. Mieda, N. Nagahora, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, Y. Hosoi, Y. Furukawa, N. Takagi, S. Nagase, and N. Tokitoh, "One-Electron Reduction of Kinetically Stabilized Dipnictenes: Synthesis of Dipnictene Anion Radicals", *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 12582-12588 (2006).
18. K. Hayakawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, and T. Takui, "Building Blocks for Organic Heterospin, Heteromolecular Complexes as Models for Organic Molecule-Based Ferrimagnets", *J. Low Temp. Phys.* **142**, 589-592 (2006).
19. H. Tanaka, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, and T. Takui, "Ground-state triplet biradicals of nitronyl nitroxide containing a nucleobase substituent as synthons for bio-inspired organic magnets", *J. Low Temp. Phys.* **142**, 605-608 (2006).
20. Y. Kanzaki, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, and T. Takui, "Magnetic properties of a nitronyl nitroxide triradical as a model for single-component molecule-based ferrimagnets", *J. Low Temp. Phys.* **142**, 597-600 (2006).
21. T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, and T. Takui, "Design and synthesis of a novel organic triradical as a model compound for generalized ferrimagnets", *J. Low Temp. Phys.* **142**, 593-596 (2006).
22. S. Suzuki, Y. Morita, K. Fukui, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, and K. Nakasuji, "Aromaticity on the pancake-bonded dimer of neutral phenalenyl radical as studied by MS and NMR spectroscopies and NICS analysis", *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 2530-2531 (2006).
23. Y. Kanzaki, D. Shiomi, C. Kaneda, T. Ise, K. Sato, and T. Takui, "Clustering of Molecular Spins in the Crystals of Nitronyl Nitroxide and Iminonitroxide Triradicals Based on Benzene-1,3,5-Triyl Frameworks", *J. Mater. Chem.* **16**, 2064-2073 (2006).
24. M. Sakai, K. Toyota, and T. Takui, "A quantum and deductive chemical study for all congeners of polybromo/chlorodibenzo-*p*-dioxin and polybromo/chlorodibenzofuran", *J. Chem. Inf. Mod.* **46**, 1269-1275 (2006).
25. T. Murata, Y. Morita, K. Fukui, Y. Yakiyama, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, and K. Nakasuji, "Multidimensional Networks of π -Conjugated Oligomers: Crystal Structures of 4,4':2',2'':4',4''-Quaterimidazole in Hydrate, Protonated Salt, and Dinucleic Copper Complexes", *Cryst. Growth Des.* **6**, 1043-1047 (2006).
26. M. Tadokoro, S. Yasuzuka, M. Nakamura, T. Shinoda, T. Tatenuma, M. Mitsumi, Y. Ozawa, K. Toriumi, H. Yoshino, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, T. Mori, and K. Murata, "A High-Conductivity Crystal Containing a Copper(I) Coordination Polymer Bridged by the Organic Acceptor TANC", *Angew. Chem. Int. Ed.* **45**, 5144-5147 (2006).
27. K. Hayakawa, D. Shiomi, T. Ise, K. Sato, and T. Takui, "Pyridine-Substituted Nitronyl Nitroxide Biradicals: A Triplet ($S = 1$) Ground State Lasting out N-Methylation", *J. Mater. Chem.* **16**, 4146-4154 (2006).
28. R. Santo, R. Miyamoto, R. Tanaka, T. Nishioka, K. Sato, K. Toyota, M. Obata, S. Yano, I. Kinoshita, A. Ichimura, and T. Takui, "Diamagnetic-paramagnetic

- conversion of tris(2-pyridylthio)methyl copper (III) via a structural change from trigonal bipyramid to octahedron”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **45**, 7611-7614 (2006).
29. T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, and T. Takui, “Watson-Crick Pairing of Nucleobases Functionalized with Open-Shell Molecular Entities in Crystalline Solids”, *Chem. Commun.* 4832-4834 (2006).
 30. T. Kubo, A. Shimizu, M. Uruichi, K. Yakushi, M. Nakano, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Y. Morita, and K. Nakasuji, “Singlet biradical character of phenalenyl-based Kekule hydrocarbon with naphthoquinoid structure”, *Org. Lett.* **9**, 81-84 (2007).
 31. K. Okada, S. Beppu, K. Tanaka, M. Kuratsu, K. Furuichi, M. Kozaki, S. Suzuki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Y. Kitagawa, and K. Yamaguchi, “Preparation, structure, and magnetic interaction of a Mn(hfac)₂-bridged [2-(3-pyridyl)(nitronyl nitroxide)-Mn(hfac)₂]₂ chain complex”, *Chem. Commun.* 2485-2487 (2007).
 32. K. Maekawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, and T. Takui, “A Guanine-substituted nitronyl nitroxide radical forming a one-dimensional ferromagnetic chain”, *Org. Biomol. Chem.* **5**, 1641-1645 (2007).
 33. S. Nishida, Y. Morita, T. Ohba, K. Fukui, K. Sato, T. Takui, and K. Nakasuji, “Control in spin-delocalization into the 2-substituted π -systems in 3-oxophenalenoxyl neutral radicals: evaluation by their dimeric structures and DFT calculations”, *Tetrahedron* **63**, 7690-7695 (2007).
 34. H. Tanaka, D. Shiomi, T. Ise, K. Sato, and T. Takui, “Cytosine-guanine base pairing in a hydrogen-bonded complex of stable open-shell molecules with S = 1 spins”, *Cryst. Eng. Comm.* **9**, 767-771 (2007).
 35. K. Sato, R. Rahimi, N. Mori, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, K. Furukawa, T. Nakamura, M. Kitagawa, K. Nakasuji, M. Nakahara, H. Hara, P. Carl, P. Hofer, and T. Takui, “Implementation of Molecular Spin Quantum Computing by Pulsed ENDOR Technique: Direct Observation of Quantum Entanglement and Spinor”, *Physica E* **40**, 363-366 (2007).
 36. M. Kuratsu, S. Suzuki, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, and K. Okada, “Magnetic Interaction of Tri- and Di-oxotriphenylamine Radical Cation FeCl₄ Salts”, *Inorg. Chem.* **46**, 10153-10157 (2007).
 37. T. Murata, Y. Morita, Y. Yakiyama, Y. Nishimura, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, and K. Nakasuji, “Zwitterionic π -radical involving EDT-TTF-imidazole and F₄TCNQ: redox properties and self-assembled structure by hydrogen-bonds and multiple S \cdots S interactions”, *Chem. Commun.* 4009-4011 (2007).
 38. K. Maekawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, and T. Takui, “Cytosine-substituted nitronyl nitroxide radicals as building blocks for generalized ferrimagnetic system”, *Polyhedron* **26**, 2347-2352 (2007).
 39. Y. Kanzaki, D. Shiomi, T. Ise, K. Sato, and T. Takui, “Magnetic Interactions in *p*-Phenylene-bis(nitronyl nitroxide) Biradicals with Large Torsion Angle”, *Polyhedron* **26**, 1890-1894 (2007).
 40. Y. Kanzaki, D. Shiomi, T. Ise, K. Sato, and T. Takui, “Benzyl-phenyl Ether Derivatives of Nitronyl Nitroxide Triradicals as a Model for Single-component Organic Molecule-based Ferrimagnetics”, *Polyhedron* **26**, 1901-1904 (2007).

41. K. Hayakawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, and T. Takui, "Stable Iminonitroxide Biradicals: Building Blocks for Organic Heterospin, Heteromolecular Complexes", *Polyhedron* **26**, 1885-1889 (2007).
42. K. Tanaka, K. Furuichi, M. Kozaki, S. Suzuki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, and K. Okada, "Preparation and Magnetic Properties of 4,6-Bis(iminonitroxide)-substituted Resorcinol and Its Cu-complex", *Polyhedron* **26**, 2021-2026 (2007).
43. M. Yano, A. Fujiwara, M. Tatsumi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, "Amine-based organic high-spin systems; Synthesis, electrochemical and spectroscopic studies of polyalkylated one-dimensional oligoaryl triamines" *Polyhedron* **26**, 2008-2012 (2007).
44. M. Yano, K. Kitagawa, M. Tatsumi, K. Sato, and T. Takui, "*m*-Phenylenediamine- based high-spin dication diradicals: Analysis of the decomposed products", *Polyhedron* **26**, 2027-2030 (2007).
45. M. Yano, M. Fujita, M. Miyake, M. Tatsumi, T. Yajima, O. Yamauchi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, "Synthesis and properties of a redox active ligand with bispicorylamino groups and its dinuclear complex", *Polyhedron*, **26**, 2174-2178 (2007).
46. H. Tanaka, D. Shiomi, T. Ise, K. Sato, and T. Takui, "Thymine-Substituted Nitronyl Nitroxide Biradical as a Triplet ($S = 1$) Component for Bio-Inspired Molecule-Based Magnets", *Polyhedron* **26**, 2230-2234 (2007).
47. Y. Morita, A. Ueda, S. Nishida, K. Fukui, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, and K. Nakasuji, "Curved Aromaticity of Corannulene-Based Neutral Radical: Crystal Structure and 3D Unbalanced Delocalization of Spin", *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 2035-2038 (2008).
48. T. Matsumoto, T. Sasamori, K. Sato, T. Takui, and N. Tokitoh, "Reduction of a Kinetically Stabilized Silabenzene Leading to the Formation of the Corresponding Anion Radical Species", *Organometallics* **27**, 305-308 (2008).
49. S. Nakazawa, K. Sato, D. Shiomi, M. L. T. M. B. Franco, M. C. R. L. R. Lazana, M. C. B. L. Shohoji, K. Itoh, and T. Takui, "Electronic and molecular structures of C_{60} -based poly-anionic high-spin molecular clusters: Direct spin identification and electron spin transient nutation spectroscopy for high spin chemistry", *Inorg. Chim. Acta.* **361**, 4031-4037 (2008).
50. Y. Morita, S. Nishida, J. Kawai, T. Takui, K. Nakasuji, "Oxophenalenoxyl: novel stable neutral radicals with a unique spin-delocalized nature depending on topological symmetries and redox states", *Pure App. Chem.* **80**, 507-517 (2008).
51. T. Sawai, K. Sato, T. Ise, D. Shiomi, K. Toyota, Y. Morita, and T. Takui, "Macrocyclic High-Spin ($S = 2$) Molecule: Spin Identification of A Sterically Rigid Metacyclophane-Based Nitroxide Tetraradical by Two-Dimensional Electron Spin Transient Nutation Spectroscopy", *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 3988-3990 (2008).
52. S. Nishida, Y. Morita, A. Ueda, T. Kobayashi, K. Fukui, K. Ogasawara, K. Sato, T. Takui, and K. Nakasuji, "Curve-Structured Phenalenyl Chemistry: Synthesis, Electronic Structure and Bowl-Inversion Barrier of a Phenalenyl-Fused Corannulene Anion", *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 14954-14955 (2008).
53. Y. Morita, S. Suzuki, K. Fukui, S. Nakazawa, H. Kitagawa, H. Kishida, H. Okamoto, A. Naito, A. Sekine, Y. Ohashi, M. Shiro, K. Sasaki, D. Shiomi, K.

- Sato, T. Takui, and K. Nakasuji, "Thermochromism in an Organic Crystal Based on the Co-existence of σ - and π -Dimers", *Nature Mater.* **7**, 48-51 (2008).
54. Y. Masuda, M. Kuratsu, S. Suzuki, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, K. Okada, "Preparation and magnetic properties of verdazyl-substituted dihydrophenazine radical cation tetrachloroferrate salts", *Polyhedron* **28**, 1950-1954 (2009).
 55. M. Yano, M. Manabe, M. Tatsumi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, "Synthesis and properties of a redox active starburst ligand with three bispicorylamino groups and its trinuclear complexes", *Polyhedron* **28**, 1935-1939 (2009).
 56. M. Yano, S. Tsuda, M. Tatsumi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, "Amine-based organic high-spin systems; a room-temperature-stable one-dimensional oligoaryl triamine-based trication", *Polyhedron* **28**, 1883-1887 (2009).
 57. M. Yano, Y. Okino, Y. Ichihara, M. Tatsumi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, "Organic High-Spin Systems; Synthesis, Electrochemical and Spectroscopic Studies of π -Extended Tetraaryl *m*-Phenylenediamines", *Polyhedron* **28**, 1764-1767 (2009).
 58. S. Suzuki, T. Takeda, M. Kuratsu, M. Kozaki, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, K. Okada, "Pyrene-Dihydrophenazine Bis(Radical Cation) in a Singlet Ground State", *Org. Lett.* **11**, 2816-2818 (2009).
 59. A. Kunishita, M. Kubo, H. Sugimoto, T. Ogura, K. Sato, T. Takui, and S. Itoh, "Mononuclear Copper(II)-Superoxo Complexes that Mimic the Structure and Reactivity of the Active Centers of PHM and D \square M", *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 2788-2789 (2009).
 60. Y. Masuda, M. Kuratsu, S. Suzuki, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Y. Hosokoshi, X.-Z. Lan, Y. Miyazaki, A. Inaba, K. Okada, "A New Ferrimagnet Based on a Radical-Substituted Radical Cation Salt", *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 4670-4673 (2009).
 61. K. Sato, S. Nakazawa, R. Rahimi, T. Ise, S. Nishida, T. Yoshino, N. Mori, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Yakiyama, Y. Morita, M. Kitagawa, K. Nakasuji, M. Nakahara, H. Hara, P. Carl, P. Hofer, and T. Takui, "Molecular electron-spin quantum computers and quantum information processing: pulse-based electron magnetic resonance spin technology applied to matter spin-qubits", *J. Mater. Chem.* **19**, 3739-3754 (2009).
 62. K. Sugisaki, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, M. Kitagawa, and T. Takui, "Ab initio Calculations of Spin-Orbit Contribution to the Zero-Field Splitting Tensors of $n\pi^*$ Excited States by the CASSCF Method with MRMP2 Energy Correction", *Chem. Phys. Lett.* **477**, 369-373 (2009).
 63. T. Koto, K. Sato, D. Shiomi, K. Toyota, K. Itoh, E. Wasserman, and T. Takui, "Random-Orientation High-Spin Electron Spin Resonance Spectroscopy and Comprehensive Spectral Analyses of the Quintet Dicarbene and Dinitrene with *Meta*-Topological Linkers: Origins of Peculiar Line-Broadening in Fine-Structure ESR Spectra in Organic Rigid Glasses", *J. Phys. Chem. A* **113**, 9521-9526 (2009).
 64. T. Koto, K. Sugisaki, K. Sato, D. Shiomi, K. Toyota, K. Itoh, E. Wasserman, P. M. Lahti, and T. Takui, "High-Spin Nitrene Fine-Structure ESR Spectroscopy in Frozen Rigid Glasses: Exact Analytical Expressions for the Canonical Peaks and

- A D-Tensor Gradient Method for Line-Broadening”, *App. Magn. Reson.* **37**, 703-736 (2009).
65. H. Tanaka, D. Shiomi, S. Suzuki, M. Kozaki, K. Okada, K. Sato, and T. Takui, “Diaminotriazine-substituted nitronyl nitroxide: a novel building block for organic magnets having multiple hydrogen bonding substituents as structure-determining supramolecular synthons”, *Cryst. Eng. Comm.* **12**, 526-531 (2010).
 66. K. Maekawa, S. Nakazawa, H. Atsumi, D. Shiomi, K. Sato, M. Kitagawa, T. Takui, and K. Nakatani, “Programmed Assembly of Organic Radicals on DNA”, *Chem. Commun.* **46**, 1247-1249 (2010).
 67. A. Ueda, S. Nishida, K. Fukui, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, K. Nakasuji, and Y. Morita, “Three-Dimensional Intramolecular Exchange Interaction in a Curved and Nonalternant π -Conjugated System: Corannulene with Two Phenoxy Radicals”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49**, 1678-1682 (2010).
 68. K. Matsumoto, D. Inokuchi, Y. Hirao, H. Kurata, K. Sato, T. Takui, and T. Kubo, “Synthesis and Identification of A Trimethylenemethane Derivative π -Extended with Three Pyridinyl Radicals”, *Org. Lett.* **12**, 836-839 (2010).
 69. H. Atsumi, K. Maekawa, S. Nakazawa, D. Shiomi, K. Sato, M. Kitagawa, T. Takui, and K. Nakatani, “Noncovalent Assembly of TEMPO Radicals Pair-wise Embedded on a DNA Duplex”, *Chem. Lett.*, **39**, 556-557 (2010). DOI:10.1246/cl.2010.556)
 70. Y. Morita, Y. Yakiyama, S. Nakazawa, T. Murata, T. Ise, D. Hashizume, D. Shiomi, K. Sato, M. Kitagawa, K. Nakasuji, and T. Takui, “Triple-Stranded Metallo-Helicates Addressable as Lloyd’s Electron Spin Qubits”, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 6944-6946 (2010). (DOI:10.1021/ja102030w)
 71. A. Konishi, Y. Hirao, M. Nakano, A. Shimizu, E. Botek, B. Champagne, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, K. Matsumoto, H. Kurata, and T. Kubo, “Synthesis and Characterization of Teranthene: A Singlet Biradical Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Having Kekule Structures”, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 11021-11023 (2010). (DOI:10.1021/ja1049737)
 72. A. Ueda, K. Ogasawara, S. Nishida, T. Ise, T. Yoshino, S. Nakazawa, K. Sato, T. Takui, K. Nakasuji, and Y. Morita, “A Bowl-Shaped ortho-Semiquinone Radical Anion: Quantitative Evaluation of the Dynamic Behavior of Structural and Electronic Features”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **49**, 6333-6337 (2010). DOI:10.1002/anie.201002626)
 73. K. Sugisaki, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, M. Kitagawa, and T. Takui, “Spin-Orbit Contributions in High-Spin Nitrenes/Carbenes: A Hybrid CASSCF/MRMP2 Study of Zero-Field Splitting Tensors”, *Chem. Phys. Chem.*, **11**, 3146-3151(2010). (DOI:10.1002/cphc.201000492)
 74. Akihiro Shimizu, Takashi Kubo, Mikio Uruichi, Kyuya Yakushi, Masayoshi Nakano, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Yasukazu Hirao, Kouzou Matsumoto, Hiroyuki Kurata, Yasushi Morita, and Kazuhiro Nakasuji, “Alternating Covalent Bonding Interactions in a One-Dimensional Chain of a Phenalenyl-Based Singlet Biradical Molecule Having Kekul Structures”, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 14421–14428 (2010). DOI: 10.1021/ja1037287
 75. Yuki Masuda, Hiroataka Takeda, Masato Kuratsu, Shuichi Suzuki, Masatoshi Kozaki, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Keiji Okada, “Radical-substituted dihydrophenazine radical cation salts: Molecular packing

- structure and bulk magnetic property”, *Pure Appl. Chem.*, **82**, 1025-1032 (2010). DOI: 10.1351/PAC-CON-09-10-04
76. Shuichi Suzuki, Kozo Fukui, Akira Fuyuhiko, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Kazuhiro Nakasuji, Yasushi Morita, “Hexaazaphenalene Derivatives: One-Pot Synthesis, Hydrogen-Bonded Chiral Helix, and Fluorescence Properties”, *Organic Lett.*, **12**, 5036-5039 (2010). DOI: 10.1021/ol102200v
77. Shuichi Suzuki, Takanori Furui, Masato Kuratsu, Masatoshi Kozaki, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Keiji Okada, “Nitroxide-Substituted Nitronyl Nitroxide and Iminonitroxide”, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 15908-15910 (2010). DOI: 10.1021/ja107769z
78. Akira Ueda, Kanako Ogasawara, Shinnsuke Nishida, Kozo Fukui, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Kazuhiro Nakasuji, Yasushi Morita, “Air-stable Curved pi-Radical Based on Corannulene: Dynamic Electronic-spin Structure Induced by Temperature-dependent Conformational Changes”, *Australian J. Chem.*, **60**, 1627-1633 (2010). DOI: 10.1071/CH10280

【小澤 G】

79. J. Gea-Banacloche, and M. Ozawa, “Minimum-energy pulses for quantum logic cannot be shared”, *Phys. Rev. A* **74**, 060301(R) (2006).
80. M. Ozawa, “Noise and disturbance in quantum measurements and operations”, *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.* 6244, 62440Q (1-9) (2006).
81. M. Hotta, T. Karasawa, and M. Ozawa, “N-body-extended channel estimation for low-noise parameters”, *J. Phy. A: Mathematical and General* **39**, 14465-14470 (2006).
82. T. Karasawa, and M. Ozawa, “Conservation-law-induced quantum limits for physical realizations of the quantum NOT gate”, *Phys. Rev. A* **75**, 032324 (2007).
83. M. Ozawa, Simultaneous measurability of non-commuting observables and the universal uncertainty principle, *Proc. 8th Int. Conf. on Quantum Communication, Measurement and Computing* (NICT Press, Tokyo, 2007), 363-368.
84. G. Kimura, B.K. Meister, and M. Ozawa, “Quantum limits of measurements induced by multiplicative conservation laws: Extension of the Wigner-Araki-Yanase Theorem”, *Phys. Rev. A* **78**, 032106 (2008).
85. T. Karasawa, M. Ozawa, J. Gea-Banacloche, and K. Nemoto, “Quantum precision limits for any implementation of single qubit gates under conservation laws”, *Int. J. Quant. Info.* **6**, 701-706 (2008).
86. Y. Nakajima, Y. Kawano, and H. Sekigawa, Efficient quantum circuits for approximating the Jones polynomial, *Quant. Inf. Comp.* **8**, No. 5, pp. 489-500 (2008).
87. T. Karasawa, J. Gea-Banacloche, and M. Ozawa, “Gate fidelity of arbitrary single-qubit gates constrained by conservation laws”, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 225303 (2009)
88. H. Nishimura and M. Ozawa, “Perfect computational equivalence between quantum Turing machines and finitely generated uniform quantum circuit families”, *Quant. Inf. Proc.* **8**, 13-24 (2009)

89. Y. Nakajima, Y. Kawano, H. Sekigawa, M. Nakanishi, S. Yamashita, and Y. Nakashima, "Synthesis of quantum circuits for d-level systems using KAK decomposition", *Quant. Inf. Comp.* **9**, No. 5&6, pp. 0423-0443 (2009).
90. T. Karasawa, M. Ozawa, and K. Nemoto, "Theoretical constraints on implementations of arbitrary single-qubit gates under conservation laws, Quantum Communication", Measurement and Computing (QCMC): Ninth International Conference on QCMC, AIP Conference Proceedings 1110 (2009), 411-414.

【中村 G】

91. J. Bourassa, J. M. Gambetta, A. A. Abdumalikov Jr., O. Astafiev, Y. Nakamura, and A. Blais, "Ultrastrong coupling regime of cavity QED with phase-biased flux qubits", *Phys. Rev. A* **80**, 032109 (2009).
92. H. Jung, Y. Kim, K. Jung, H. Im, Y. A. Pashkin, O. Astafiev, Y. Nakamura, H. Lee, Y. Miyamoto, and J. S. Tsai, "Potential barrier modification and interface states formation in metal-oxide-metal tunnel junctions", *Phys. Rev. B* **80**, 125413 (2009).
93. K. Inomata, T. Yamamoto, M. Watanabe, K. Matsuba, and J. S. Tsai, "Film-thickness dependence of 10 GHz Nb coplanar-waveguide resonators", *J. Vac. Sci. Technol. B* **27**, 2286-2291 (2009)
94. M. Watanabe, K. Inomata, T. Yamamoto, and J. S. Tsai, "Power-dependent internal loss in Josephson bifurcation amplifiers", *Phys. Rev. B* **80**, 174502 (2009).
95. O. Astafiev, A. M. Zagoskin, A. A. Abdumalikov. Jr, Y. A. Pashkin, T. Yamamoto, K. Inomata, Y. Nakamura, and J. S. Tsai, "Resonance fluorescence of a single artificial atom", *Science* **327** 840-843 (2010).
96. F. Yoshihara, Y. Nakamura, J. S. Tsai, "Correlated flux noise and decoherence in two inductively coupled flux qubits", *Phys. Rev. B*, **81**, 132502-1-132502-4 (2010)
97. A. A. Abdumalikov Jr., O. Astafiev, A. Zagoskin, Y. Pashkin, Y. Nakamura, J. S. Tsai, "Electromagnetically induced transparency on a single artificial atom", *Phys. Rev. Lett.* **104**, 19, 193601-1-193601-4 (2010)
98. O. Astafiev, A. Abdumalikov, A. Zagoskin, Y. Pashkin, Y. Nakamura, J. S. Tsai, "Ultimate on-chip quantum amplifier", *Phys. Rev. Lett.* **104**, 183603-1-183603-4 (2010)
99. T. Tamegai, Y. Tsuchiya, Y. Nakajima, T. Yamamoto, Y. Nakamura, J. S. Tsai, M. Hidaka, H. Terai, Z. Wang, "Preferential diagonal penetration of vortices into superconducting networks" *Physica C* **470**, 734-738 (2010)
100. J. Pekola, V. Maisi, S. Kafanov, N. Chekurov, A. Kemppinen, Y. Pashkin, O. Saira, M. Mottonen, J. S. Tsai, "Environment-assisted tunneling as an origin of the dynes density of states", *Phys. Rev. Lett.* **105**, 026803-1-026803-4 (2010)
101. K. Koshino, S. Ishizaka, Y. Nakamura, "Deterministic photon-photon $\sqrt{\text{SWAP}}$ gate using a Λ system", *Phys. Rev. A*, **82**, 010301-1-010301-4 (2010)

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

1. 工位武治、中澤重顕、佐藤和信、塩見大輔、豊田和男、「有機ラジカル量子ビット」—分子スピン量子コンピュータ/量子情報処理技術の開発—、機能材料、2008年7月号、28巻、No. 7、49-61頁、シーエムシー出版
2. 森田 靖、「空気中でも安定に取り扱うことができる有機中性ラジカル:スピン非局在型の電子スピン構造と動的な電子スピン物性の創成」、機能材料、2008年7月号、28巻、No. 7、13-20頁、シーエムシー出版
3. 北川 勝浩、工位 武治、佐藤 和信、森田 靖、「分子スピン量子コンピュータ/量子情報処理システムの開発」、化学と工業, 62, pp.31-33 (2009).
4. K. Sato, S. Nakazawa, R. D. Rahimi, S. Nishida, T. Ise, D. Shiomi, K. Toyota, Y. Morita, M. Kitagawa, P. Carl, P. Höfer, T. Takui, “Quantum computing using pulse-based electron-nuclear double resonance (ENDOR): Molecular spin-qubits”, in “Molecular Realizations of Quantum Computing 2007”, 106 pages, edited by M. Nakahara, Y. Ota, and R. Rahimi, World Scientific Publisher (2009).
5. Quantum Computing Using Pulse-based Electron-Nuclear Double Resonance (ENDOR): Molecular Spin-Qubits, Kazunobu Sato, Shigeaki Nakazawa, Rababeh D. Rahimi, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Patrick Carl, Peter Höfer, Takeji Takui. In *Molecular Realizations of Quantum Computing 2007* (Kinki University Series on Quantum Computing, Vol. 2); M. Nakahara, Y. Ota, R. Rahimi, Y. Kondo, M. Tada-Umezaki, Eds., World Scientific, p. 58-162, 2009.
6. Y. Nakamura, "Tailor-made quantum states", *Nature*, **459**, 516-517 (2009)
7. T. Ladd, F. Jelezko, R. Laflamme, Y. Nakamura, C. Monroe, J. O'Brien, "Quantum computers", *Nature*, **464**, 45-53 (2010)
8. J. S. Tsai, "Toward a superconducting quantum computer harnessing macroscopic quantum coherence", *Proceedings of the Japan Academy Series B*, **86**, 4, 275-292 (2010)

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

- ① 招待講演 (国内会議 11件、国際会議 49件)

【北川 G】

- 1 M. Kitagawa, “Towards True Quantum Computation with Nuclear and Electron Spins in Molecules,” Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry “Material-oriented Quantum Chemistry,” May 28, 2006, Osaka, Japan.
- 2 Masahiro Kitagawa, Schumacher compression with minimum time-space product. The Ninth Workshop on Quantum Information Processing Paris, January 16-20, 2006
- 3 武田和行, A laptop NMR spectrometer, 20周年記念第40回固体NMR・材料研究会/第5回強磁場固体 NMR フォーラム 合同研究会, 京都ガーデンパレス, (2006) 10.16-17.
- 4 M. Kitagawa, “Physical and information theoretical initializations for ensemble quantum computers without measurement,” Workshop on Theory of Quantum Computation,

- Communication, and Cryptography (TQC2007) & Nara Advanced Interdisciplinary Workshop on Quantum Information Science (NAIST WS), 25 Jan. 2007, Nara, Japan.
- 5 香川晃徳、室川遊、武田和行、北川勝浩、光励起三重項電子スピンを用いた DNP のための部分的重水素化によるプロトン密度の最適化, 第 47 回 NMR 討論会、2009 年 11 月 12 日～14 日、筑波大学 大学会館講堂(つくば市天王台)
 - 6 Masahiro Kitagawa, Hyperpolarized Hyper-precision Magnetic Resonance towards Molecular Spin Quantum Computation, CREST 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, 2010.4.6

【工位 G】

- 7 R. D. Rahimi, K. Sato, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, M. Kitagawa, K. Nakatsuji, and T. Takui, "Complete Magnetic Tensors of Diphenylnitroxide Radical as A Molecular Entity for Quantum Information Science: Determination of Its Tensors by Single-Crystal Electron Magnetic Resonance and Theoretical analyses", The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, Dec. 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA.
- 8 Morita, Y.; Murata, T.; Fukui, K.; Nakasuji, K., "Exploring Design Criteria for Molecular Conductor: New Roles of Hydrogen Bonding in Charge-Transfer Complex.", 2005 環太平洋国際化学会議 (The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 115 entitled "Science and Engineering of the Future with Multifunctional Conducting Molecular Materials", 2005 年 12 月 15～20 日、米国ハワイ州ホノルル
- 9 Morita, Y., "Unprecedented Dynamic Properties in Purely Organic Open-Shell Systems Based on Phenalenyl", The 8th OCU International Workshop on Advanced Molecular Science and Chemistry: Highlight Lectures of the 2005 Academic Year, 2006 年 3 月 16 日、大阪市立大学
- 10 Morita, Y. Challenges in Purely Organic Open-shell Molecules: Spin-Center Transfer and Molecular Crystalline Battery, Symposium in The Graduate School of Engineering Science "Organic Materials and Carbon Nano Science: Development of Molecular Electronics" (with Professor A. J. Heeger, 2000 Nobel laureate) 「有機分子・カーボンナノ構造の科学的解明と分子エレクトロニクスへの展開」2006 年 6 月 5 日、大阪大学
- 11 Takeji Takui, Molecular-Spin Quantum Computers/Quantum Information Processing, CREST/IRS workshop "Quantum Information and Computation" August 8-9, 2006, Tokyo, Japan
- 12 Kazunobu Sato, Molecular-Spin Bus Quantum Computers by the Use of Pulsed ENDOR Spin Technology, CREST/IRS workshop "Quantum Information and Computation" August 8-9, 2006, Tokyo, Japan
- 13 K. Sato, R. Rahimi, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, K. Furukawa, T. Nakamura, M. Kitagawa, K. Nakasuji, H. Hara, P. Carl, P. Hofer, and T. Takui, Molecular-Spin Quantum Entanglement between Electron and Nuclear Spins by Pulsed ENDOR Technique, Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
- 14 T. Takui, K. Sato, R. Rahimi, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, K. Furukawa, T. Nakamura, M. Kitagawa, K. Nakasuji, H. Hara, P. Carl, and P. Hofer, Molecular-Spin Bus Quantum Computers by the Use of Pulsed ENDOR and ELDOR Spin Technology: Molecular Design for Molecular-Spin Qubits Open-Shell Entities, Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
- 15 Sato, K.; Rahimi, R.; Yoshino, T.; Nishida, S.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Ueda, A.; Suzuki, S.; Furukawa, K.; Nakamura, T.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Hara, H.; Carl, P.; Hofer, P.; Takui, T. Implementation of Molecular-Spin Quantum Computing by Pulsed Electron Magnetic Resonance Technique, Sendai-Berlin-Novosibirsk Joint Seminar on

- Advanced EPR, August 28-31, 2006, Novosibirsk, Russia,
- 16 N. Mori, K. Sugisaki, K. Fukui, S. Nakazawa, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, and T. Takui, Ab Initio Calculations of the Spin-Spin Interactions of the pi-Conjugated Spin Delocalized Systems: Application of Unrestricted Moller-Plesset Second Perturbation Theory, Sendai-Berlin-Novosibirsk Joint Seminar on Advanced EPR, August 28-31, 2006, Novosibirsk, Russia,
 - 17 Morita, Y., Charge-Transfer Complexes and Salts Based on Phenalenyl Systems International Workshop of Molecular Function in Kansai, 2006年11月13日、大阪市立大
 - 18 Kazunobu Sato, Molecular-Spin Quantum Computing by Pulsed Electron Magnetic Resonance, International Workshop of Molecular Function in Kansai, November 13, 2006, Osaka, Japan
 - 19 佐藤和信, 分子スピン量子コンピュータの開発, 第45回電子スピンサイエンス学会年会「ミニシンポジウムII」, 2006/11/14-16
 - 20 Morita, Y. Design, Synthesis, and Properties of Extremely Spin-Delocalized Stable Open-Shell Molecules. Mini-symposium on “Present and future of the molecular spin research: What we expect from designable spin system?” 第45回電子スピンサイエンス学会年会 (SEST2006) ミニシンポジウム 2006年11月14日、京都工芸繊維大学
 - 21 工位 武治, 分子スピン量子コンピュータの実現に向けて、第1回分子科学討論会 2007、東北大学、2007/9/17-20
 - 22 Takeji Takui, “Quantum Computing using Electron-Nuclear Double Resonance”, Symposium on Physical Realization of Quantum Computing: Superconducting and Molecular Qubits, Oct. 31- Nov. 2, 2007, Yutorito Higashi-Osaka, Japan.
 - 23 森田 靖, 「空気中でも安定に取り扱うことができる有機ラジカル: 動的電子スピン構造から化学電池まで」 東北大学世界トップレベル研究拠点 (WPI) プログラム「原子分子材料科学高等研究機構」東北大学グローバル COE プログラム「分子系高次構造体化学国際教育研究拠点」WPI-GCOE シンポジウム 2008年6月5日、東北大学
 - 24 Y. Morita, “Air-stable Organic Neutral Radicals: From Dynamic Electronic-spin Natures to Chemical Batteries” International Symposium on Molecular Conductors (ISMC2008), 2008年7月23日-25日、分子科学研究所
 - 25 Kazunobu Sato, Shigeaki Nakazawa, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Mikio Nakahara, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, “Coherent-Dual ELDOR Technique for Implementation of Molecular-Spin Quantum Computers”, The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
 - 26 Nobuyuki Mori, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Shigeki Nakazawa, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, “The g- and A-Tensors Engineering of Weakly Exchange-Coupled Electron-Spin Systems for QC-ELDOR: Single-Crystal ESR Spectral Simulation of Diphenylnitroxide-Based Biradical Systems”, The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
 - 27 Y. Morita, “Molecular Crystalline Secondary Battery: Design and Properties of Molecule-based New Functionality”, Fourth East Asia Symposium on Functional Dyes and Advanced Materials (EAS4), 2009年6月2日-5日、大阪インターナショナルハウス (Keynote lecturer)
 - 28 Morita, Y.; Murata, T.; Ueda, A.; Nishida, S.; Kariyazono, K.; Sato, K.; Takui, T. “Air-stable Carbon-centered Neutral Radicals without Steric Protection”, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日-18日、淡路夢舞台国際会議場
 - 29 Pulse-based electron magnetic resonance spin technology and a chemists’ materials challenge: A few steps towards molecular spin quantum computers and quantum

- information processing, Takeji Takui, March 25, 2010, The 43rd Annual International Meeting of the ESR Group of the RSC, Cardiff, UK
- 30 Shigeaki Nakazawa, Tomoaki Ise, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Robabeh D. Rahimi, Yumi Yakiyama, Yasushi Morita, Tsuyoshi Murata, Daisuke Hashizume, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Hofer, and Takeji Takui (Osaka City Univ.), “A Few Steps toward Molecular Spin Quantum Computing and Quantum Information Processing: Pulse-Based Electron Magnetic Resonance Spin Technology and A Chemists' Materials Challenge”, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials (Global COE Program) & Third International Conference on Nanospintronics Design and Realization, Osaka University, Osaka, Japan. 2010.05.30, oral (invited).
 - 31 Shigeaki Nakazawa, Tomoaki Ise, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Robabeh D. Rahimi, Yumi Yakiyama, Yasushi Morita, Tsuyoshi Murata, Daisuke Hashizume, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Hofer, and Takeji Takui (Osaka City Univ.), “A Few Steps towards the Implementation of Molecular Spin Quantum Computers: Pulse-Based Electron Magnetic Resonance Spin Technology”, Joint Euromar 2010 and 17th ISMAR Conference (A WorldWide Magnetic Resonance 2010), Palazzo dei Congressi and Palazzo degli Affari, Florence, Italy. 2010.07.08, oral (invited).
 - 32 A. Ueda (Osaka Univ.), S. Suzuki, K. Okada, T. Ise, K. Sato, T. Takui, and Y. Morita, “Air-stable Chiral Phenalenyl Radical: Design, Synthesis, and Properties”, 3rd EuCheMS Chemistry Congress Nürnberg 2010, Nürnberg, Germany, August 29 - September 2, 2010. 2010.08.30, oral (invited). 2010.08.30, oral (invited).
 - 33 K. Okada (Osaka City Univ.), “Successive magnetic phase transitions of (nitronyl nitroxide)-substituted trioxytriphenylamine radical cation salts”, V International Conference on HIGH-SPIN MOLECULES AND MOLECULAR MAGNETS and IV Russian-Japanese Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices", Nizhny Novgorod, Russian Federation. 2010.09.06, oral (invited).
 - 34 T. Takui (Osaka City Univ.), “A few steps toward molecular spin quantum computing and quantum information processing: pulse-based electron magnetic resonance spin technology and a chemists' materials challenge for synthetic spin qubits”, V International Conference on HIGH-SPIN MOLECULES AND MOLECULAR MAGNETS and IV Russian-Japanese Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices", Nizhny Novgorod, Russian Federation. 2010.09.06, oral (invited).

【小澤 G】

- 35 M. Ozawa, Universal Uncertainty Principle and Quantum State Control, Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry “Material-oriented Quantum Chemistry,” Osaka, Japan, May 28, 2006.
- 36 M. Ozawa, Simultaneous measurability of non-commuting observables and the universal uncertainty principle, The Eighth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC2006), Tsukuba, Japan, November 29, 2006.
- 37 M. Ozawa, Classification of Quantum Instruments, 28th Conference on Quantum Probability and Related Topics, Guanajuato, Mexico, September 6, 2007.
- 38 小澤正直、量子情報の数学的基礎：量子測定理論と量子集合論、日本数学会秋季総合分科会、東京、2008年9月25日。
- 39 M. Ozawa, Uncertainty Principle, Conservation Laws, and the Size of Quantum Controllers, Workshop: Osamu Hirota, A True Quantum Communications, Perimeter Institute, Waterloo, Canada, June 26, 2008.
- 40 M. Ozawa, Quantum measurement theory: mathematical and conceptual foundations, UK-Japan Quantum Information Workshop, the British Embassy Tokyo, Japan, January 23, 2009.

- 41 小澤正直、量子測定理論の構築と展開、日本物理学会、東京、2009年3月29日。
 42 M. Ozawa, Universal uncertainty principle, simultaneous measurability, and weak values, The Tenth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC 2010), Brisbane, Australia, July 19, 2010.

【中村 G】

- 43 Y. Nakamura (RIKEN/NEC), "Decoherence in superconducting qubits", International Workshop on Dynamical Decoupling (IWODD), Boulder, USA, October 6th (2009)
 44 O. Astafiev (RIKEN), "Quantum optics with artificial quantum systems", I.F. Schegolov Memorial Conference on Low-Dimensional Metallic and Superconducting Systems, Chernogolovka, Russia, October 11-16 (2009)
 45 H. Im (Dongguk Univ./RIKEN), Y.A. Pashkin, Y. Kim, K. Jung, H. Jung, T. Li, H. Lee, Y. Miyamoto, Y. Nakamura, J. S. Tsai, "Interface dependent transport in superconducting tunnel junction devices", 2009 East Asia Symposium on Superconductor Electronics (EASSE2009), Nanjing, China, October 14th (2009)
 46 A. Abdumalikov (RIKEN), "Quantum Optics with Artificial Atom in Open Space", 2nd International Workshop on Dynamics and Manipulation of Quantum Systems, Tokyo, Japan, October 14th (2009)
 47 O. Astafiev (RIKEN), "Quantum optics with artificial atoms", 445th Wilhelm and Else Heraeus Seminar: Quantum Measurement and Metrology with Solid State Devices, Bad Honnef, Germany, November 2nd (2009)
 48 Y. Nakamura (RIKEN/NEC), "Superconducting Qubit in 1D Electromagnetic Environment", International Conference on Quantum Information and Technology, Tokyo, Japan, December 4th (2009)
 49 Y. Nakamura (RIKEN/NEC), "Artificial Atom in Open 1D Space", Waseda Meeting on Quantum Technologies: Information and Communication, Tokyo, Japan, December 11th (2009)
 50 J. S. Tsai (RIKEN/NEC), "Quantum Optics with Josephson Qubits", 3rd International Workshop on Solid-state Quantum Computing & The Hong Kong forum on Quantum Control, Hong Kong, China, December 12th (2009)
 51 A. Abdumalikov (RIKEN), "Quantum Optics with artificial atoms", Workshop on Superconductivity and its Application in Quantum Devices, Warth, Austria, February 28th – March 7th (2010)
 52 O. Astafiev (RIKEN), "Quantum optics on superconducting quantum systems", Workshop on Quantum Physics using superconducting Artificial Atoms and Nanomechanics, Atsugi, Japan, March 4th (2010)
 53 Y. Nakamura (RIKEN/NEC), "Superconducting qubits coupled to a transmission line", 2010 APS March Meeting Tutorial Lecture, Portland, USA, March 14th (2010)
 54 Y. Nakamura (RIKEN/NEC), "Josephson junction qubits", International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, April 6th (2010)
 55 Y. Nakamura (RIKEN/NEC), "Decoherence in superconducting flux qubits", Coherence in Superconducting Qubits (CSQ2010), San Diego, USA, April 26th (2010)
 56 Y. Nakamura (RIKEN/NEC), "Artificial atom in 1D open space", Quantum Information processing with Spins and Superconductors (QISS2010), Waterloo, Canada, May 17th (2010)
 57 J. S. Tsai (RIKEN/NEC), "Macroscopic quantum scattering - quantum optics with Josephson qubit", International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Suita, Japan, June 4th (2010)
 58 O. Astafiev (RIKEN), "Quantum optics with artificial quantum systems", Mesoscopic Structures: Fundamentals and Applications (MSFA-2010), Novosibirsk, Russia, June 24th (2010)
 59 O. Astafiev (RIKEN), "Quantum optics on artificial quantum systems", Nano Peter 2010, St. Petersburg, Russia, June 27th (2010)

- 60 Y. Nakamura (RIKEN/NEC), “Strong coupling of an artificial atom to a continuum of one-dimensional electromagnetic modes”, 10th Asian Conference on Quantum Information Science (AQIS 10), Tokyo, Japan, August 28-31 (2010)

【北川 G】

1. 北川勝浩、小川瑞史、片岡暁. Logarithmic-width Enumerative Coding, 第 28 回情報理論とその応用シンポジウム 2005 年 11 月 20 日～23 日
2. RAHIMI, Robabeh・佐藤和信・西田辰介・塩見大輔・豊田和男・上田 顕・鈴木修一・森田靖・中筋一弘・北川勝浩・工位武治. 室温単結晶 CW-ENDOR 及びパルス ESR による QC 分子スピンジフェニルニトロキシドの磁氣的テンソルの実験的再決定と理論計算. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
3. RAHIMI, Robabeh・佐藤和信・西田辰介・塩見大輔・豊田和男・上田顕・鈴木修一・森田靖・中筋一弘・北川勝浩・工位武治. 阪大院基礎工・阪市大院理・阪大院理・JST CREST. 室温単結晶 CW-ENDOR 及びパルス ESR による QC 分子スピンジフェニルニトロキシドの磁氣的テンソルの実験的再決定と理論計算. 第 86 春季年会. 日本大学. 06/03/27-30
4. R. D. Rahimi, K. Sato, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, M. Kitagawa, K. Nakasuji, T. Takui, Complete magnetic tensors of diphenylnitroxide radical as a molecular entity for quantum information science: Determination of their tensors by single-crystal electron magnetic resonance and their theoretical analyses, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA.
5. 武田和行, Nuclear integrated cross polarization / Studies on MQMAS under strong rf pulses using a microcoil, 大阪大学蛋白質研究所セミナー「より巨大な生体分子系の解析をめざした磁気共鳴法—高感度化と長距離測定—」, 大阪大学蛋白質研究所, (2006), 7/27-28.
6. 北川勝浩、分子の NMR を使った量子コンピュータの研究、高分子学会NMR研究会、大阪大学待兼山会館、(2006) 11.2.
7. 武田和行, A laptop NMR spectrometer, 第 45 回 NMR 討論会, 京都大学百周年時計台記念館, (2006) 11.22-24.
8. 犬飼宗弘, 武田和行, マイクロコイルを用いた強い RF 照射下における MQMAS の研究, 第 45 回 NMR 討論会, 京都大学百周年時計台記念館, (2006) 11.22-24.
9. Robabeh Rahimi, 齋藤暁, 中原幹夫, 北川勝浩, Single-experiment-detectable multipartite entanglement witness for ensemble quantum computing, 日本物理学会 2007 年春季大会, 鹿児島大学, 2007 年 3 月 19 日.
10. 武田 和行, A highly integrated FPGA-based NMR spectrometer, 第 11 回マイクロイメージング研究会慶應義塾大学三田キャンパス 2007 年 8 月 6 日
11. Robabeh Rahimi, Akira SaiToh, and Mikio Nakahara, Entanglement and decoherence in electron spin bus systems for quantum computing, Asian Conference on Quantum Information Science 2007, talk, Kyoto University, Kyoto.
12. Akira SaiToh, Robabeh Rahimi, Mikio Nakahara, and Masahiro Kitagawa, Numerical evaluation of decoherence in non-classical correlation, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2007, talk, 26-28 September 2007, Osaka University, Toyonaka
13. Akira SaiToh, Nonclassical correlation useful for playing a game: quantum mixed-strategy game, Symposium on Physical Realization of Quantum Computing: Superconducting and Molecular Qubits, talk, Oct. 31-Nov. 2, 2007, Yutorito Higashi-Osaka, Higashi-Osaka.
14. Robabeh Rahimi, Akira SaiToh, and Mikio Nakahara, Entanglement and Decoherence in Molecular-Based Quantum Computer, 第 63 回日本物理学会年次大会, talk, 26aRF-4, 3月 22-26, 2008, 近畿大学東大阪キャンパス
15. Masahiro Kitagawa, Akinori Kagawa, Yu Murokawa, Kazuyuki Takeda, Initialization of solid-state NMR quantum computers by DNP using photo-excited triplet electron spins, Gordon Reserch Conferences Quantum Infomation Science, 15-20 April 2007, II Ciocco. Italy

16. Akira SaiToh, Robabeh Rahimi, and Mikio Nakahara, Non-classical correlation in a multipartite quantum system reconsidered, International Iran Conference on Quantum Information 2007, Kish, Iran, September 7-10, 2007.
17. Akira SaiToh, Matrix product state simulation for the study of quantum information processing: An introductory lecture, One-Day Workshop on Topics in Quantum Computing, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran, September 15, 2007.
18. M. Negoro, K. Tateishi, A. Kagawa, M. Kitagawa, Initialization of molecular nuclear spin quantum computer with dynamic nuclear polarization using photoexcited triplet electrons, 22nd Quantum Information Technology Symposium, Osaka, Japan (2010), May 10, 2010
19. 香川 晃徳, 動的核偏極による核スピン量子コンピュータの初期化, 第3回 KARC-Σ 連携セミナー「量子情報科学の新展開を探る」2010.4.22
20. Masahiro Kitagawa, Hyperpolarized Hyper-precision Pulsed Magnetic Resonance towards Molecular Spin Quantum Computation, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka, Japan, 2010.06.03
21. Akinori Kagawa, Initialization of an Solid-State NMR Quantum Computer by Dynamic Nuclear Polarization Using Photoexcited Triplet Electron Spins, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka, Japan, 2010.06.03

【工位 G】

22. 小笠原華菜子・森田靖・上田顕・福井晃三・小林忠弘・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 一置換コラヌレン誘導体の結晶構造:置換基が曲面 π 共役構造や分子間相互作用に及ぼす影響 阪大院理・阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
23. 金城茂盛・森展之・松岡秀人・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・Dolphin, David H・Lin, Wei-Ching・the late McDowell, Charles A・工位武治 単結晶 ESR/ENDOR 及び ab initio 分子軌道法による静的擬ヤーンテラー歪みを受けたコバルト(II)オクタエチルポルフィリンの電子構造 阪市大院理・分子研・ブリティッシュコロンビア大 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
24. 杉崎研司・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・工位武治 オリゴナイトレンの UV-vis スペクトルに現れる長波長領域吸収の起源:高精度分子軌道計算による研究 阪市大院理 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
25. 福井晃三・森田靖・小林忠弘・西田辰介・上田顕・小笠原華菜子・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 フェナレニル骨格を組み込んだ曲面 π 拡張型コラヌレンの合成と電子構造 阪大院理・阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
26. 上田顕・森田靖・福井晃三・小笠原華菜子・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 コラヌレン-フェノキシラジカル結合体の合成とそのスピン非局在性 阪大院理・阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
27. 増田有希・小寄正敏・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・岡田恵次 7,8-ジメチル-2-フェルダジル-5,10-ジエチル-5,10-ジヒドロフェナジンラジカルカチオンの合成と磁氣的性質 阪市大院理 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
28. 沢井隆利・伊瀬智章・佐藤和信・塩見大輔・豊田和男・工位武治 CW-ESR 法によるメタシクロファンニトロキシド高スピン分子の電子状態と分子構造 阪市大院理 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
29. 吉田健太・鈴木修一・福井晃三・中舎真美・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・森田靖・中筋一弘 α 位に6個のメキシ基を導入した高対称性フェナレニルの合成と性質 阪大院理・阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
30. 鈴木修一・森田靖・福井晃三・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 二つのメキシ基を導入した 1,3-ジアザフェナレニルラジカルの合成と性質 阪大院理 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
31. 西田辰介・森田靖・福井晃三・佐藤和信・塩見大輔・中筋一弘・工位武治 1,6-ジチアピレン置換 6-オキソフェナレノキシル中性ラジカルの合成と溶液中における分子内電子移動

- 阪大院理・阪大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
32. 佐藤和信・RAHIMI, Robabeh・新納隆・西田辰介・上田顕・鈴木修一・森田靖・古川貢・豊田和男・塩見大輔・中村敏和・北川勝浩・中筋一弘・原英之・工位武治 パルス ENDOR による分子スピン量子絡み合い状態の生成と相互変換 阪市大院理・阪大院基礎工・阪大院理・分子研・ブルカーバイオスピン・JST CREST 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 33. 吉野共広・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・武隈真一・Rahimi, Robabeh・北川勝浩・工位武治 ESR/ENDOR 法によるグアイアズレノンラジカルの超微細結合定数の決定と電子構造: 量子スピンコンピュータへの応用の試み 阪市大院理・近畿大理工・阪大院基礎工・JST CREST 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 34. 竹中宏紀・野崎幹人・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 核酸塩基を導入した弱結合型ニトロニルニトロキシドラジカルの磁氣的性質 阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 35. 岡内孝文・佐藤和信・森展之・豊田和男・塩見大輔・工位武治・Lin, W. C.・Dolphin, D.・the late McDowell, C. A. 単結晶 ENDOR 法、及び DFT 法による正方対称銅(II)ポルフィリンの磁氣的パラメータ 阪市大院理・ブリティッシュコロロンビア大 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 36. 古藤輝明・佐藤和信・塩見大輔・豊田和男・工位武治 2次元電子スピンニューテーション分光法による高スピン分子の無秩序配向微細構造 ESR スペクトルの解析, 阪市大院理 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 37. 川島千加・西尾尊久・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・LIN, W.C.・DOLPHIN, D.・MCDOWELL, C.A.・工位武治 単結晶 ESR/ENDOR 法、及び DFT 計算による基底 6 重項鉄(III)オクタエチルポルフィリンの電子構造 阪市大院理・ブリティッシュコロロンビア大 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 38. 前川健典・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 一般化フェリ磁性スピン系の構成分子としての基底一重項ラジカルの磁性 阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 39. 田中啓之・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 ニトロニルニトロキシドラジカルに核酸塩基を導入した水素結合錯体の構造と磁性 阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 40. 野崎幹人・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 ジアミノピリジン型人工核酸塩基を導入したニトロニルニトロキシドラジカルの結晶構造と磁氣的性質 阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 41. 伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 アデニンーチミン分子錯体を用いた純有機フェリ磁性体の構築 阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 42. 早川健一・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 安息香酸置換ラジカルを用いて合成した新奇トリラジカルの構造と磁性 阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 43. 神崎祐貴・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 クラウンエーテル誘導体を用いた有機ラジカル超分子錯体の磁性 阪市大院理・JST さきがけ 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 44. 森展之・福井晃三・中澤重顕・武隈真一・武隈真一・吉田善一・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・工位武治 超分子 C60 モノアニオンのシクロデキストリン包接場の影響を受けたヤーン・テラー変形と反応性 阪市大院理・阪大院理・理研・近畿大理工 第 86 春季年会 日本大学 06/03/27-30
 45. 竹部晶仁・梅崎慎也・中川 望・太田 克・岸 亮平・高橋英明・古川信一・久保孝史・森田靖・中筋一弘・鎌田賢司・太田浩二・中野雅由 ビニレン架橋をもつフェナレニルラジカル化合物の非線形光学効果の理論的研究. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス
 46. 梅崎慎也・竹部晶仁・中川 望・太田 克・岸 亮平・高橋英明・古川信一・久保孝史・森田

- 靖・中筋一弘・鎌田賢司・太田浩二・中野雅由 アセチレン架橋をもつフェナレニルラジカル化合物の非線形光学効果の理論的研究. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス
47. 佐藤和信・RAHIMI, Robabeh・新納 隆・西田辰介・上田 顕・鈴木修一・森田 靖・古川 貢・豊田和男・塩見大輔・中村敏和・北川勝浩・中筋一弘・原 英之・工位武治 パルス ENDOR による分子スピン量子絡み合い状態の生成と相互変換. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 48. 中野雅由・岸 亮平・太田 克・中川 望・梅崎慎也・竹部晶仁・高橋英明・古川信一・久保孝史・森田 靖・中筋一弘・鎌田賢司・太田浩二・ CHAMPAGNE, Benoit・BOTEK, Edith・山口 兆 フェナレニルラジカル含有縮環共役系の非線形光学効果の理論的研究. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 49. 中川 望・岸 亮平・太田 克・梅崎慎也・竹部晶仁・高橋英明・古川信一・久保孝史・森田 靖・中筋一弘・鎌田賢司・太田浩二・中野雅由 イオウ原子を含むフェナレニルラジカル含有縮環共役系の非線形光学効果の理論的研究. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 50. 鎌田賢司・太田浩二・久保孝史・清水章弘・森田 靖・中筋一弘・中野雅由・岸 亮平・太田 克・中川 望・古川信一・高橋英明 ジラジカル性縮環共役化合物の二光子吸収特性. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 51. 福井晃三・森田 靖・小林忠弘・西田辰介・上田 顕・小笠原華菜子・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 フェナレニル骨格を組み込んだ曲面 π 拡張型コラヌレンの合成と電子構造. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 52. 西田辰介・森田 靖・福井晃三・佐藤和信・塩見大輔・中筋一弘・工位武治 1,6-ジチアピレン置換 6-オキソフェナレノキシル中性ラジカルの合成と溶液中における分子内電子移動. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 53. 村田剛志・森田 靖・瀧宮和男・大坪徹夫・斎藤軍治・中筋一弘 セレン原子導入型 TTF-イミダゾール誘導体及びその電荷移動錯体の合成と物性. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 54. 宮崎榮吾・森田 靖・梅本欽一・榎.優・中筋一弘 シトシン部位を有する TTF および DTPY 誘導体を用いた水素結合型電荷移動錯体・塩の合成と水素結合様式の考察. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 55. 鈴木修一・森田 靖・福井晃三・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 二つのメキシ基を導入した 1,3-ジアザフェナレニルラジカルの合成と性質. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 56. 吉田健太・鈴木修一・福井晃三・中舎真美・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・森田 靖・中筋一弘 α 位に6個のメキシ基を導入した高対称性フェナレニルの合成と性質. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 57. 上田顕・森田 靖・福井晃三・小笠原華菜子・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 コラヌレン-フェノキシルラジカル結合体の合成とそのスピン非局在性. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 58. 焼山佑美・村田剛志・森田 靖・中筋一弘 クアテルイミダゾールを配位子に用いた三重らせん構造を有する二核金属錯体の合成とその性質. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 59. 清水章弘・久保孝史・中野雅由・岸 亮平・太田 克・中川望・鎌田賢司・太田浩二・森田 靖・中筋一弘 ナフトキノイド構造を有するピラジカロイド化合物の結晶構造と二光子吸収特性. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
 60. 後藤悠子・久保孝史・森田 靖・中筋一弘 二つのフェナレニル環をアセチレンで架橋した

ビラジカロイド化合物の合成と電子構造の解明. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。

61. Morita, Y.; Nishida, S.; Fukui, K.; Sato, K. Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. Spin-Center Transfer and Solvato-/Thermochromism in A Purely Organic, 6-Oxophenalenoxyl Neutral Radical System. 第6回分子スピン国際シンポジウム 名古屋大学 06/3/14-15
62. Suzuki, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. New Ligands with Extensively π -Conjugated System: Syntheses of Nitrogen-Incorporated Phenalenyl Derivatives and Their Metal Complexes. The 7th International 21 Century COE Symposium on Intergrated EcoChemistry (COEIEC VII、第7回国際21世紀COE自然共生化学会議)、2005 年 12 月 20 日、米国ハワイ州ホノルル。
63. Nishida, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. 6-Oxophenalenoxyl Neutral Radical Linked with TTF: Switchable Spin Structure and Color by Control of Intramolecular Electron Transfer. 2005 環太平洋国際化学会議 (The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 94 entitled "Molecular Switching"、2005 年 12 月 15～20 日、米国ハワイ州ホノルル。
64. Kubo, T.; Shimizu, A.; Sakamoto, M.; Uruichi, M.; Yakushi, K.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Design, Synthesis, and Intermolecular Interaction of Delocalized Singlet Biradical Compounds. 2005 環太平洋国際化学会議 (The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 111 entitled "Designed π -Electronic Systems: Synthesis, Properties, Theory and Function"、2005 年 12 月 15～20 日、米国ハワイ州ホノルル。
65. S. Suzuki, Y. Morita, K. Fukui, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, K. Nakasuji, Syntheses, properties and crystal structures of hexaazaphenalenyl anion as a new multi-valent ligand, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
66. N. Mori, K. Fukui, S. Nakazawa, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, M. T. Franco, M. B. Shohoji, M. R. Lazana, T. Takui, Theoretical study of the electronic structures of fullerene C60 monoanion and polyanions in the high-spin states with potassium counter cations, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
67. N. Mori, K. Fukui, S. Nakazawa, S. Takekuma, H. Takekuma, Z. Yoshida, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, Electronic and molecular structures of supramolecularly bicapped C60 fullerene monoanion generated by NH₃-gas doping in the crystalline solid, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
68. N. Mori, K. Fukui, S. Nakazawa, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, M. T. Franco, M. B. Shohoji, M. R. Lazana, T. Takui, Ab initio MP2 study of the electronic and molecular structures of fullerene C60 and C70 in the high spin states, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
69. T. Okauchi, K. Sato, K. Toyota, D. Shiomi, H. Sakamoto, H. Fujimoto, T. Takui, W. C. Lin, D. H. Dolphin, C. A. McDowell, Electronic and molecular structures of Cu(II)octaethylporphyrin as studied by single-crystal ENDOR spectroscopy and DFT calculations: Salient features of degenerate nuclear-spin states ENDOR, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
70. K. Okada, S. Hiraoka, T. Okamoto, H. Takeda, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Synthesis, structure and magnetic properties of radical-substituted dihydrophenazine radical cation derivatives, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
71. K. Sugisaki, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, Electronic excited states of high-spin

- nitrenes: An ab initio MO study, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
72. D. Shiomi, T. Ise, K. Hayakawa, M. Nozaki, H. Tanaka, H. Takenaka, K. Sato, T. Takui, Supramolecular synthons in crystal engineering of organic molecule-based magnetics, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 73. I. Tomoaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Crystal structure and magnetic properties of a nitronyl nitroxide triradical as a model for generalized ferrimagnetic spin alignment, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 74. S. Kinjo, N. Mori, N. Yokokura, H. Matsuoka, K. Sato, K. Toyota, D. Shiomi, D. H. Dolphin, W. Lin, T. A. McDowell, T. Takui, Cobalt(II)octaethylporphyrin undergoing pseudo Jahn-Teller distortion in tetragonal symmetry as studied by single-crystal ESR/ENDOR spectroscopy and theoretical calculations of electronic structure and magnetic parameters, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 75. K. Fukui, Y. Morita, S. Nishida, A. Ueda, T. Kobayashi, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, K. Nakasuji, Exchange interaction and spin density eistribution of corannulene-based new neutral radicals with curved-surface pi-conjugation, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 76. K. Sugisaki, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, Theoretical analysis of substituent effects on the electronic excited states of triplet phenylnitrene, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 77. M. Nozaki, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Nucleobase-substituted nitronyl nitroxide radicals as key components for bio-inspired molecule-based magnets, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 78. Y. Kanzaki, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Crystal structure and magnetic properties of an organic triradical based on 1,3,5-substituted benzene framework as a model for single-component organic molecule-based ferrimagnetics, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 79. K. Maekawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Crystal structure and magnetic properties of complexes composed of transition metal ions and organic ground-state singlet biradicals as models for generalized ferrimagnetism, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 80. K. Hayakawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Crystal structure and magnetic properties of organic supramolecular complexes based on hydrogen bonding and acid-base pairing, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 81. H. Tanaka, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Magnetic properties and crystal structure of cytosine-substituted nitronyl nitroxide biradical in a triple ground state, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 82. T. Sawai, T. Ise, K. Sato, D. Shiomi, K. Toyota, T. Takui, Electronic and molecular structures of metacyclophane-based nitroxide tetradical as studied by cw and pulsed ESR spectroscopy and X-ray crystal structure analysis, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu,Hawaii, USA
 83. T. Koto, K. Sato, N. Mori, D. Shiomi, K. Toyota, P. M. Lahti, T. Takui, Electronic and molecular structures of pnitronylnitroxide(phenylnitrene) in the high-spin quartet state as studied by pulsed ESR-based electron spin nutation spectroscopy and D-tensor calculations, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005,

- December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
84. D. Baba, R. Rahimi, K. Sato, K. Toyota, D. Shiomi, M. Kitagawa, P. M. Lahti, T. Takui, Spin density distributions of 2-(N-aminoxyl-N-t-butyl)benzimidazole as studied by cw and pulsed ENDOR spectroscopy, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
 85. C. Kawashima, T. Nishio, K. Sato, N. Mori, K. Toyota, D. Shiomi, D. H. Dolphin, W. Lin, C. A. The late McDowell, T. Takui, Pseudo Jahn-Teller distorted Fe(III)(Cl)octaethylporphyrin in the high-spin state as studied by single-crystal cw ENDOR and pulsed ESR spectroscopy, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
 86. K. Sato, R. Rahimi, T. Niinou, K. Furukawa, K. Toyota, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa, T. Takui, Quantum entanglement between electron and nuclear spins and implementation of quantum information processing by pulsed ENDOR: An application of molecular spinics, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
 87. M. Yano, Y. Nakanishi, M. Tatsumi, M. Oyama, K. Sato, T. Takui, Organic high-spin systems: Synthesis and properties of an oligoarylamine-based trication triradical with novel electronic structure, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
 88. S. Nishida, Y. Morita, K. Fukui, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, K. Nakasuji, 6-Oxophenalenoxyl neutral radical linked with TTF: Switchable spin structure and color by control of intramolecular electron transfer, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, The Pacificchem 2005, December 15-21, 2005, Honolulu, Hawaii, USA
 89. 森田 靖、鈴木修一、福井晃三、佐藤和信、塩見大輔、工位武治、中筋一弘 開設有機分子の超分子化学:溶液状態における中性ラジカル π ダイマーの形成とサーモクロミズム第1回ホスト・ゲスト化学シンポジウム2006年5月29-30日
 90. 佐藤和信・R.Rahimi・西田辰介・森田靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・工位武治, パルス ESR/ENDOR と分子スピバス量子コンピュータ, ESR フォーラム研究会, 2006/06/10
 91. 村田剛志・森田 靖・焼山佑美・矢持秀起・齋藤軍治・中筋一弘 電荷移動錯体中における水素結合相互作用:イミダゾールを基盤にした導電性分子集合体の設計と合成第 89 回有機合成シンポジウム2006年6月12日-14日
 92. 吉野 共広, 佐藤 和信, Rahimi Robabeh, 西田 辰介, 豊田 和男, 塩見 大輔, 森田 靖, 北川 勝浩, 工位 武治, 電子一核二重共鳴法による分子スピバス量子コンピュータモデルの電子構造と性質, 分子構造総合討論会, 2006/09/20-23
 93. 佐藤 和信, RAHIMI Robabeh, 新納 隆, 西田 辰介, 上田 顕, 鈴木 修一, 森田 靖, 古川 貢, 豊田 和男, 塩見 大輔, 中村 敏和, 北川 勝浩, 中筋 一弘, 工位 武治, パルス ENDOR を用いた分子スピバス量子コンピュータモデル分子の量子状態変換分子構造総合討論会, 2006/09/20-23
 94. 森 展之, 岡内 孝文, 豊田 和男, 佐藤 和信, 塩見 大輔, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, 工位 武治, 銅(II)オクタエチルポルフィリンの単結晶 CW-ESR/ENDOR 及び量子化学計算による研究分子構造総合討論会, 2006/09/20-23
 95. 豊田 和男, 森 展之, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 工位 武治, 有機高スピン分子系の零磁場分裂定数の非経験的計算分子構造総合討論会, 2006/09/20-23
 96. 早川 健一, 伊瀬 智章, 塩見 大輔, 佐藤 和信, 工位 武治, アニリン置換ニトロキシドビラジカルを構成要素とする超分子有機錯体の構造と磁性, 分子構造総合討論会, 2006/09/20-23
 97. 古藤 輝明, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 豊田 和男, 伊藤 公一, Edel Wasserman, 工位 武治, CW、パルス ESR 法を用いた高スピン有機分子の無秩序配向微細構造 ESR スペクトルの解析, 分子構造総合討論会, 2006/09/20-23
 98. 沢井 隆利, 伊瀬 智章, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 豊田 和男, 工位 武治, 2D-ESTN 分光

- 法によるメタシクロファンニトロキシドテトララジカルの電子状態と分子構造, 分子構造総合討論会, 2006/09/20-23
99. Sato, K.; Rahimi, R.; Nishida, S.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Ueda, A.; Suzuki, S.; Furukawa, K.; Nakamura, T.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Hara, H.; Carl, P.; Hofer, P.; Takui, T., Implementation of Molecular-Spin Quantum Computers by Pulsed ENDOR Technique, Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry, May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 100. Ise T., Tanaka H., Shiomi D., Sato K., Takui T., Crystal structure and magnetic properties of nucleobase-substituted stable organic radicals as building blocks for bio-inspired molecule-based magnets, 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM), August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 101. Morita Y., Suzuki S., Nishida S., Fukui K., Sato K., Shiomi D., Takui T., Nakasuji K., Purely Organic Extremely Spin-Delocalized Open-Shell Systems: Structure and Aromaticity of Neutral Radical pi-Dimer and Application for Molecular Crystalline Secondary Battery, 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM), August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 102. Teruaki Koto, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Koichi Itoh, Edel Wasserman and Takeji Takui, Complete Analyses of Powder-Pattern CW- and Pulse-Based ESR Spectra of the First Quintet Organic Molecule, Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
 103. N. Mori, T. Okauchi, T. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, W. C. Lin, D. H. Dolphin, the late C. A. McDowell, and T. Takui, Magnetic Parameters of Cu(II)octaethylporphyrin as Studied by Single-Crystal ESR/ENDOR Spectroscopy and DFT Calculations, Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
 104. Shinsuke Nishida, Yasushi Morita, Kozo Fukui, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuhiro Nakasuji, Takeji Takui, Multifunctional Organic Open-Shell Systems: Spin-Center Transfer and Color Change of 6-Oxophenalenoxyl Neutral Radicals with Electron-Donor Moieties, Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
 105. Takatoshi Sawai, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, and Takeji Takui, Electronic and Molecular Structures of Macrocyclic Molecule Based Nitroxide Tetraradical by Two-Dimensional Electron Spin Transient Nutation Spectroscopy, Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
 106. Morita, Y.; Nishida, S.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K., Tetrathiafulvalene and 1,6-Dithiapyrene Revisited: Spin-Center Transfer and Solvato-/Thermochromism in Purely Organic 6-Oxophenalenoxyl Neutral Radical Systems, 22nd International Symposium on The Organic Chemistry of Sulfur (ISOCS-22), August 20-25, 2006, Saitama, Japan
 107. 三神武文・近松真之・千阪二郎・清水章弘・久保孝史・森田 靖・中筋一弘・吉田郵司・阿澄玲子・八瀬清志 フェナレニル骨格を有する両極性有機半導体の TFT 特性 2006 年秋季第 67 回応用物理学会学術講演会 滋賀県草津市 2006 年 8 月 29 日～9 月 1 日
 108. Sato, K.; Rahimi, R.; Mori, N.; Nishida, S.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Ueda, A.; Suzuki, S.; Furukawa, K.; Nakamura, T.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Nakahara, M.; Hara, H.; Carl, P.; Hofer, P.; Takui, T., Molecular-Spin Quantum Computing by the Use of Electron and Nuclear Spins, Asian Conference on Quantum Information Science 2006 (AQIS 2006), September 1-4, 2006, Beijing, China
 109. Morita, Y.; Nishida, S.; Suzuki, S.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K., Challenges in Purely Organic Open-shell Molecules: Spin-Center Transfer, Single-Crystal Thermochromism and Molecular Crystalline Battery, Porquerolles International Conference on Reactive Intermediates and Unusual Molecules 2006 (ISRIUM 2006), 2006 年 9 月 2 日～9 日、Porquerolles Island, France
 110. 鎌田賢司・太田浩二・久保孝史・清水章弘・森田 靖・中筋一弘・中野雅由・岸 亮平・太田克・中川 望・古川信一・高橋英明 フェナレニル基を有する一重項ジラジカル化合物の二光子吸収特性 2006 年光化学討論会 2006 年 9 月 10 日～12 日

111. 金井 要・山根宏之・池滝何以・久保孝史・清水章弘・隅井良平・吉田弘幸・堤 潤也・佐藤直樹・森田 靖・中筋一弘・関一彦 Ph2-IDPL 薄膜の電子構造分子構造総合討論会 2006 静岡市 2006 年 9 月 20 日～23 日
112. 池滝何以・清水章弘・久保孝史・金井 要・王 志宏・大内幸雄・森田 靖・中筋一弘・関一彦 グラファイト上の非局在型一重項ピラジカル Ph2-IDPL 薄膜の STM 観察 日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 23 日～26 日
113. 金井 要・久保孝史・清水章弘・山根宏之・池滝何以・隅井良平・森田 靖・中筋一弘・関一彦 正逆光電子分光による Ph2-IDPL 薄膜の電子状態の研究日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 23 日～26 日
114. Kamada, K.; Ohta, K.; Kubo, T.; Shimizu, A.; Morita, Y.; Nakasuji, K.; Kishi, R.; Ohta, S.; Furukawa, S.; Takahashi, H.; Nakano, M. Two-photon Absorption Property of Singlet Diradical Hydrocarbons, International Conference on Organic Photonics and Electronics 2006/9th International Conference on Organic Nonlinear Optics (ICONO 9 - ICOPE 2006), 2006 年 9 月 24 日～28 日、Brugge, Belgium
115. イミダゾール部位を有する電荷移動錯体の合成と物性: 水素結合相互作用による電子的効果に起因した導電性発現への試み, 焼山佑美・村田剛志・森田 靖・中筋一弘, 第 90 回有機合成シンポジウム, 2006 年 11 月 9 日～10 日、東京。
116. フェナレニルを基盤とした非局在型一重項ピラジカルの合成と単分子及び分子集合状態の性質 清水章弘・久保孝史・売市幹大・薬師久弥・中野雅由・鎌田賢司・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・森田 靖・中筋一弘, 第 90 回有機合成シンポジウム, 2006 年 11 月 9 日～10 日、東京。
117. 佐藤和信・Robabeh RAHIMI・西田辰介・森田靖・豊田和男・塩見大輔・中原幹夫・北川勝浩・中筋一弘・工位武治 電子-核スピン系のスピン量子絡み合い状態の形成と起源, 第 45 回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学
118. 杉崎研司・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・工位武治 高スピンアリルジナイトレンの光生成に伴う UV/Vis スペクトルの時間変化に関する理論的研究, 第 45 回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学
119. 吉野共広・西田辰介・佐藤和信・Robabeh Rahimi・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治 電子-核二重共鳴法による溶液系分子スピンバス量子コンピュータモデル分子としてのジフェニルニトロキシドとその誘導体の電子構造と性質, 第 45 回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学
120. 森展之・岡内孝文・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・Wei-Ching Lin・David H. Dolphin・the late Charles A. McDowell・工位武治 単結晶 CW-ESR/ENDOR 法により決定した銅(II) オクタエチルポルフィリンの磁気テンソルの DFT 量子化学計算による再現性, 第 45 回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学
121. 森展之・岡内孝文・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・Wei-Ching Lin・David H. Dolphin・the late Charles A. McDowell・工位武治 単結晶 CW-ESR/ENDOR 法により決定した銅(II) オクタエチルポルフィリンの磁気テンソルの DFT 量子化学計算による再現性, 第 45 回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学
122. 西田 辰介・森田 靖・森口実紀・福井 晃三・塩見大輔・佐藤 和信・佐藤正春・中筋一弘・工位 武治 分子結晶性二次電池の開発: 6- オキソフェナレノキシル中性ラジカルのレドックス性に基づく特異な充放電挙動, 第 45 回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学
123. 鈴木修一・吉田健太・福井晃三・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・森田 靖・中筋一弘 フェナレニルを基盤とした新しい縮合多環型の中性ジラジカルの二量体構造と動的挙動, 第 45 回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16
124. 前川健典・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 一般化フェリ磁性系の構成要素としての核酸塩基置換ニトロニルニトロキシドラジカルの磁性, 第 45 回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学

125. 上田 顕・森田靖・西田辰介・福井晃三・伊瀬智章・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 コラヌレン骨格を基盤とした曲面 π 共役型ジラジカルの分子構造と電子スピン構造, 第45回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学
126. 沢井隆利・伊瀬智章・佐藤和信・塩見大輔・豊田和男・工位武治 二次元電子スピンニューテーション法によるメタシクロファンニトロキシドテトララジカルの電子・分子構造の研究, 第45回電子スピンサイエンス学会年会, 2006/11/14-16 京都工芸繊維大学
127. Synthetic Challenges in Purely Organic Open-shell Molecules: Spin-Center Transfer and Molecular Crystalline Battery. Morita, Y.; Nishida, S.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. Tenth International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-10) 2006年11月13日-17日、京都。
128. 久保孝史・山口理恵・森田 靖・中筋一弘, 解離性プロトンを有する金属錯体電子ドナーの開発, アクアシンポジウム, 2006年12月22日、大阪大学
129. 佐藤和信 分子スピン量子コンピュータの開発, 分子精密制御の物質化学 2006, 2006/12/26
130. 森田 靖, 特異なスピン非局在様式を持つ安定中性ラジカルの開発, 分子スピン第8回シンポジウム, 2007年1月13日-14日、東京大学。
131. Tokishiro Karasawa and Masanao Ozawa, Quantum precision limits given by the gate trace distance and the gate fidelity, Workshop on Theory of Quantum Computation, Communication, and Cryptography (TQC2007) & Nara Advanced Interdisciplinary Workshop on Quantum Information Science (NAIST WS), 25 Jan. 2007, Nara, Japan.
132. 森田 靖, 二次電池のエネルギー密度 269 Ah/kg を実現した低分子量の結晶性純有機分子活物質の電子構造に関する基礎研究, 大阪大学サステイナビリティ・サイエンス研究機構科学技術開発工房ワークショップ, 2007年2月7日、大阪大学。
133. 伊藤 則之・古市 公彬・鈴木 修一・小寄 正敏・佐藤 和信・塩見 大輔・工位 武治・岡田 恵次 ジメチルメチレンビス(イミノニトロキシド)の合成と磁氣的性質, 日本化学会第87春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
134. 倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡田 恵次 安定ラジカル置換酸素架橋トリフェニルアミン誘導体とそのラジカルカチオン塩の合成と性質, 日本化学会第87春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
135. 鈴木 修一・小寄 正敏・岡田 恵次・佐藤 和信・塩見 大輔・工位 武治・福井 晃三・森田 靖・中筋 一弘 ヘリセン型 1,6-ジアザフェナレニルラジカルの合成と電子スピン構造, 日本化学会第87春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
136. 西田 辰介・森田 靖・福井 晃三・塩見 大輔・佐藤 和信・中筋 一弘・工位 武治 レドックスの温度依存性: 6-オキソフェナレノキシル型中性ラジカルにおける分子内電子移動挙動, 日本化学会第87春季年会, 2007/3/25-28
137. 小笠原 華菜子・上田 顕・横山 正幸・福井 晃三・西田 辰介・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・森田 靖・中筋 一弘 安定中性ラジカルを一つ導入したコラヌレン誘導体の合成と電子スピン構造の実験的解明, 日本化学会第87春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
138. 上田 顕・森田 靖・西田 辰介・福井 晃三・伊瀬 智章・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘 フェノキシラジカル部位を二個有するコラヌレン誘導体の結晶構造と磁氣的性質, 日本化学会第87春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
139. 沢井 隆利・伊瀬 智章・佐藤 和信・塩見 大輔・豊田 和男・工位 武治 シクロファンニトロキシドテトララジカル五重項種の分子構造とゼロ磁場分裂テンソルの半経験的計算, 日本化学会第87春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
140. 吉野 共広・伊瀬 智章・森 展之・西田 辰介・佐藤 和信・豊田 和男・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治 開殻分子の電子スピンを利用する分子スピン量子コンピュータモデル系の探索: ビラジカル系希釈単結晶における交換相互作用, 日本化学会第87春季年会, 2007/3/25-28、関西大学

141. 佐藤 和信・原 雄太・豊田 和男・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・原 英之・CARL, Patrick・HOEFER, Peter・工位 武治 コヒーレント電子-電子二重共鳴を用いた時間比例位相増加法によるマイクロ波パルスの位相制御, 日本化学会第 87 春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
142. 吉野 共広・西田 辰介・佐藤 和信・Rahimi, Robabeh・豊田 和男・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治 量子情報操作を目的とする分子スピンバスモデル化合物 DPNO 誘導体の溶液 ESR/ENDOR 法による研究, 日本化学会第 87 春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
143. 古藤 輝明・佐藤 和信・塩見 大輔・豊田 和男・伊藤 公一・Wasserman, Edel・工位 武治 高スピンフェニルカルベン、オリゴニトレン系の無秩序配向 ESR スペクトルにおける吸収線形の広幅化と分子構造揺らぎの相関, 日本化学会第 87 春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
144. 伊瀬 智章・吉野 共広・森 展之・西田 辰介・佐藤 和信・豊田 和男・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治 電子-電子スピン系分子 QC モデルとなる TEMPO ビラジカル系希釈単結晶の ESR/ENDOR スペクトル, 日本化学会第 87 春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
145. 森 展之・岡内 孝文・豊田 和男・佐藤 和信・塩見 大輔・Lin, W. C.・Dolphin, D. H.・MCDOWELL, C. A.・工位 武治 密度汎関数法による銅(II)オクタエチルポルフィリンの磁気テンソル計算, 日本化学会第 87 春季年会, 2007/3/25-28、関西大学
146. 焼山佑美・村田剛志・山本陽介・森田 靖・中筋一弘。イミダゾールを連結した 1,6-ジチアピレンが形成する水素結合とその電荷移動錯体の性質 日本化学会第 87 春季年会、2007 年 3 月 25 日～28 日、関西大学。
147. 山本陽介・焼山佑美・村田剛志・森田 靖・中筋一弘。イミダゾールが縮環した初めての TTF 型電子ドナー分子の合成とその性質。日本化学会第 87 春季年会、2007 年 3 月 25 日～28 日、関西大学。ポスター発表。
148. 清水章弘・久保孝史・森田 靖・中筋一弘。二つのフェナレニルをアントラセンでつないだ非局在型一重項ビラジカルの合成と電子構造の解明。日本化学会第 87 春季年会、2007 年 3 月 25 日～28 日、関西大学。
149. 後藤悠子・久保孝史・売市幹大・薬師久彌・冬広 明・森田 靖・中筋一弘 ビスフェナレニル型ビラジカロイドの一電子酸化状態の性質 日本化学会第 87 春季年会、2007 年 3 月 25 日～28 日、関西大学。
150. 中野雅由・岸 亮平・太田 克・竹部晶仁・名手將人・高橋英明・久保孝史・森田 靖・中筋一弘・鎌田賢司・太田浩二・CHAMPAGNE, Benoit・BOTTEK, Edith・山口 兆開殻一重項一次元分子系の三次非線形光学効果の理論的研究 日本化学会第 87 春季年会、2007 年 3 月 25 日～28 日、関西大学。
151. 中川 望・岸 亮平・太田 克・名手將人・久保孝史・鎌田賢司・太田浩二・高橋英明・古川信一・森田 靖・中筋一弘・中野雅由 フェナレニルラジカル含有縮環共役系の第二超分極率の理論的研究: 中央複素環修飾およびフェナレニル環への置換基導入効果 日本化学会第 87 春季年会、2007 年 3 月 25 日～28 日、関西大学。
152. 佐藤和信・Rahimi・吉野共広・西田辰介・伊藤智章・森展之・中沢重頭・森田靖・豊田和男・塩見大輔・中筋一弘・北川勝浩・原英之・Carl・Hofer・工位武治 パルス電子スピン共鳴と量子情報科学 第 11 回 ESR フォーラム. 京阪奈プラザ. 2007/6/9
153. 伊瀬 智章, 吉野 共広, 森 展之, 西田 辰介, 佐藤 和信, 豊田 和男, 塩見 大輔, 森田 靖, 北川 勝浩, 工位 武治. 分子スピン量子コンピュータを目指した弱交換相互作用系 TEMPO ビラジカルの磁氣的希釈単結晶 ESR/ENDOR スペクトル. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
154. 佐藤 和信 1, 2, 中澤 重頭 1, 2, RAHIMI Robabeh3, 吉野 共広 1, 西田 辰介 1, 伊瀬 智章 2, 森 展之 1, 2, 森田 靖 2, 4, 豊田 和男 1, 2, 塩見 大輔 1, 2, 中筋 一弘 4, 北川 勝浩 2, 5, 原 英之 6, Carl Patrick6, Hofer Peter6, 工位 武治 1, 2. 分子スピン量子コンピ

- ュータの要素技術としての Coherent Dual ELDOR によるマイクロ波位相制御と応用. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
155. 吉野 共広 1, 西田 辰介 1, 佐藤 和信 1, 2, Rahimi Robabeh³, 豊田 和男 1, 2, 塩見 大輔 1, 2, 森田 靖 2, 4, 北川 勝浩 2, 5, 工位 武治 1, 2. 量子コンピュータ/量子情報処理を目指した分子スピンバスモデルの探索: ESR/ENDOR 法による安定ラジカル DPNO 誘導体の電子状態の研究. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
156. 古藤 輝明 1, 佐藤 和信 1, 塩見 大輔 1, 豊田 和男 1, 伊藤 公一 1, Wasserman Edel², 工位 武治 1
高スピン有機分子に由来する無秩序配向型微細構造 ESR スペクトルの線形歪みの解析と分子構造の揺らぎ. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
157. 豊田 和男, 森 展之, 杉崎 研司, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 工位 武治
高スピン有機分子の零磁場分裂に対する電子スピン-スピン双極子項の量子化学計算
第 1 回分子科学討論会 2007. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
158. 森 展之 1, 坂本 博一 1, 岡内 孝文 1, 佐藤 和信 1, 豊田 和男 1, 塩見 大輔 1, Lin Wei-Ching², Dolphin David H.², McDowell the late Charles A.², 工位 武治 1
相対論効果を取り入れた銅(II)オクタエチルポルフィリンの全磁気テンソルの密度汎関数法による実験値の再現. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
159. 上田 顕 1, 森田 靖 1, 2, 西田 辰介 3, 福井 晃三 2, 伊瀬 智章 3, 塩見 大輔 3, 佐藤 和信 3, 工位 武治 3, 中筋 一弘 4
曲面 π 共役型安定中性ラジカル: 三次元的な分子内スピン間相互作用の解明. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
160. 沢井 隆利, 神崎 祐貴, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 豊田 和男, 工位 武治
ビフェニル骨格を有する新規ニトロニルニトロキシドビラジカルの電子状態と分子構造. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
161. 神崎 祐貴, 塩見 大輔, 沢井 隆利, 佐藤 和信, 岡田 恵次, 工位 武治
金属包接能を有するクラウンエーテル置換ニトロニルニトロキシドラジカルの電子・スピン状態. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
162. 中澤 重顕 1, 佐藤 和信 1, 塩見 大輔 1, 矢野 将文 2, 木下 隆正 1, 伊藤 公一 1, Shohoji Candida³, Franco Luisa³, Lazana Celina³, 工位 武治 1
純有機強磁性金属モデル系としての多価アニオン高スピン分子クラスターの電子構造: スピン分布と電荷の揺らぎ. 第 1 回分子科学討論会 2007. 東北大学. 2007/9/17-20
163. 西田辰介・森田 靖・森口実紀・福井晃三・塩見大輔・佐藤和信・佐藤正春・中筋一弘・工位武治
分子結晶性二次電池: フェナレニルを基盤とした安定ラジカルの正極活物質への応用と多段階の電子授受能に基づく高容量化. 8 回電池討論会. 福岡国際会議場. 2007/11/13-15
164. 伊瀬 智章・吉野 共広・中澤 重顕・森 展之・西田 辰介・佐藤 和信・豊田 和男・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治
分子スピンQCを目指した非等価なgテンソルを有する新規TEMPOジラジカルの設計と合成
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
165. 森 展之・吉野 共広・西田 辰介・伊勢 智章・中澤 重顕・豊田 和男・佐藤 和信・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治
弱交換相互作用 QC 分子スピン系の g-Engineering: QC-ELDOR
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
166. 佐藤 和信・文部 一希・中澤 重顕・豊田 和男・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・原 英之・CARL, Patrick・HOEFER, Peter・工位 武治
コヒーレントパルス電子-電子二重共鳴を用いた電子-核スピン系の量子状態制御
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30

167. 古藤 輝明・杉崎 研司・佐藤 和信・豊田 和男・塩見 大輔・伊藤 公一・Wasserman, Edel・工位 武治
有機剛体溶媒系無秩序配向状態における高スピンオリゴニトレン系の構造揺らぎの原因：
微細構造 ESR スペクトルの D テンソルグラジエント解析
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
168. 吉野 共広・西田 辰介・佐藤 和信・Rahimi, Robabeh・豊田 和男・塩見 大輔・森田 靖・
北川 勝浩・工位 武治
分子スピン量子コンピュータバスモデル化合物探索を目的とした DPNO 単結晶の
ESR/ENDOR による解析
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
169. 前川 健典・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・白川 直樹
純有機フェリ磁性体モデルとしてのトリラジカル結晶における磁気相転移
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
170. 神崎 祐貴・塩見 大輔・沢井 隆利・佐藤 和信・岡田 恵次・工位 武治
ニトロキシドピラジカルの分子会合と溶液 ESR スペクトル: ピラジカルパラドックス
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
171. 中澤 重顕・佐藤 和信・吉野 共広・伊瀬 智章・西田 辰介・森 展之・RAHIMI,
Robabeh・森田 靖・豊田 和男・塩見 大輔・北川 勝浩・中筋 一弘・原 英之・CARL,
Patrik・HOFER, Peter・工位 武治
弱交換相互作用系ピラジカル希釈単結晶の磁氣的パラメータの決定-分子の電子スピン
Qubit による2量子演算-
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
172. 田中 啓之・塩見 大輔・佐藤 和信・岡田 恵次・工位 武治
ジアミノリアジン-ウラシル塩基対を基盤とするヘテロスピン集合体の構築と磁性
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
173. 豊田 和男・杉崎 研司・佐藤 和信・塩見 大輔・工位 武治
三重項励起状態における有機分子の零磁場分裂テンソル計算法の開発—SAC-CI 法による
スピン-スピン双極子項の計算
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
174. 倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡田 恵次
酸素架橋トリフェニルアミンラジカルカチオンを構成成分とする有機-無機複合磁性体の構築
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
175. 上田 顕・森田 靖・西田 辰介・森口 実紀・福井 晃三・塩見 大輔・佐藤 和信・工位
武治・中筋 一弘
トリオキソトリアンギュレン:安定な 25π 共役型開殻有機分子の合成と物性
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
176. 横山 正幸・森田 靖・上田 顕・西田 辰介・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘
イソプロピル基を導入したトリオキソトリアンギュレン誘導体の合成と物性
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
177. 山中 あずさ・森田 靖・西田 辰介・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘
核酸塩基を導入した 6-オキソフェナレノキシル型安定中性ラジカルの合成と性質
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
178. 増田 有希・倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡
田 恵次
ラジカル置換ジヒドロフェナジンラジカルカチオンを基盤とするフェリ磁性体の創成
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
179. 小笠原 華菜子・上田 顕・福井 晃三・西田 辰介・伊瀬 智章・吉野 共広・中澤 重顕・
塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・森田 靖・中筋 一弘

- 曲面 π 共役型セミキノラジカル: アルカリ金属イオンとのキレート配位構造と電子スピン構造の解明
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
180. 沢井 隆利・神崎 祐貴・杉崎 研司・佐藤 和信・塩見 大輔・豊田 和男・岡田 惠次・工位 武治
ビフェニルニトロニルニトロキシド三重項ビラジカルの溶液 ESR スペクトルと分子構造
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
181. 原 雄太・佐藤 和信・吉田 健太・鈴木 修一・森田 靖・豊田 和男・塩見 大輔・中筋 一弘・工位 武治
ヘキサメキシフェナレニルの温度依存溶液 ESR スペクトルと電子構造
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
182. 西田 辰介・森田 靖・佐藤 和信・中筋 一弘・工位 武治
Redox-Based Spin Diversity: 6-オキソフェナレノキシルを基盤とした中性ジラジカルのレドックスに応答したスピン間相互作用
日本化学会第 88 春季年会. 大学、東京. 08/3/26-30
183. 曲面 π 共役型セミキノラジカルの電子スピン構造と対カチオンの動的挙動の解明. 小笠原華菜子・上田 顕・福井晃三・西田辰介・伊瀬智章・吉野共広・中澤重頭・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・森田 靖・中筋一弘. 第1回 π 電子系有機構造・機能研究会 2008 年 3 月 7 日～8 日、愛媛大学。
184. 多重水素結合能を有するスピン非局在型安定中性ラジカル: 核酸塩基を置換した 6-オキソフェナレノキシル誘導体の合成と電子スピン構造の解明. 山中あずさ・森田 靖・西田辰介・佐藤和信・工位武治・中筋一弘. 第1回 π 電子系有機構造・機能研究会 2008 年 3 月 7 日～8 日、愛媛大学。
185. 25 π 共役系を有する安定開殻有機分子トリオキソトリアンギュレンの合成と性質. 上田 顕・森田 靖・西田辰介・森口実紀・福井晃三・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・中筋一弘. 第1回 π 電子系有機構造・機能研究会. 2008 年 3 月 7 日～8 日、愛媛大学。
186. 35. ビス(6-オキソフェナレノキシル)ジラジカル: レドックスの多段階化と非局在型電子スピンの相互作用の解明. 西田辰介・森田 靖・佐藤和信・中筋一弘・工位武治. 第1回 π 電子系有機構造・機能研究会. 2008 年 3 月 7 日～8 日、愛媛大学。
187. 3 つのイソプロピル基を有するトリオキソトリアンギュレン誘導体の合成と性質. 横山正幸・森田 靖・上田 顕・西田辰介・佐藤和信・工位武治・中筋一弘. 第1回 π 電子系有機構造・機能研究会. 2008 年 3 月 7 日～8 日、愛媛大学。
188. Daisuke Shiomi, Kensuke Maekawa, Mikito Nozaki, Hiroyuki Tanaka, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, and Takeji Takui,
DNA nucleobases as building blocks for molecule-based magnetics
1st Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"
June 30-July 2, 2007, Novosibirsk, Russia
189. Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Nobuyuki Mori, Shigeaki Nakazawa, Yasushi Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Kazuhiro Nakasuji, Masahiro Kitagawa, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui
Materials Challenges and Model Compounds for molecular-spin quantum computers and Quantum Information Science: Guiding Principles for molecular designs
1st Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"
June 30-July 2, 2007, Novosibirsk, Russia
190. Tomoaki Ise, Tomohiro Yoshino, Nobuyuki Mori, Shinsuke Nishida, Kazunobu Sato, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Takeji Takui
Search for electron-electron molecular-spin quantum computer model compounds: weakly exchange-coupled electron systems
1st Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"
June 30-July 2, 2007, Novosibirsk, Russia

191. Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Takeji Takui
An ESR/ENDOR study of diphenyl nitroxides and its derivatives as models for molecular-spin bus quantum computers and quantum information processing
1st Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"
June 30-July 2, 2007, Novisibirsk, Russia
192. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Masafumi Yano, Takamasa Kinoshita, M. Luisa T. M. B. Franco, M. Celina R. L. R. Lazana, M. Candida B. L. Shohoji, Koichi Itoh and Takeji Takui
Organic pluri-anionic high-spin molecular clusters as models for organic ferromagnetic metals
1st Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"
June 30-July 2, 2007, Novisibirsk, Russia
193. Kensuke Maekawa, Hiroyuki Tanaka, Daisuke Shiomi, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, and Takeji Takui
Hetero-spin molecular crystals based on WATSON-CRICK base pairing
1st Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"
June 30-July 2, 2007, Novisibirsk, Russia
194. Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Nobuyuki Mori, Shigeaki Nakazawa, Yasushi Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Kazuhiro Nakasuji, Masahiro Kitagawa, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui
Molecular-spin quantum computing by pulsed electron magnetic resonance: application of molecular spins to Quantum Information Science
1st Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"
June 30-July 2, 2007, Novisibirsk, Russia
195. Shinsuke Nishida, Yasushi Morita, Miki Moriguchi, Kozo Fukui, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Masaharu Satoh, Kazuhiro Nakasuji, Takeji Takui
Molecular crystalline secondary batteries: properties of phenalenyn-based on multi-stage REDOX systems as cathode active organic materials
1st Russian-Japanese Workshop "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices"
June 30-July 2, 2007, Novisibirsk, Russia
196. Morita, Y.; Fukui, K.; Nakasuji, K.; Nishida, S.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.
Trioxotriangulene: 25 pi-Conjugated Neutral Radical with High Stability and Multi-Redox Ability in a Solution and Solid States
International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules (ISRIUM)
August 19-24, Ascona, Switzerland
197. Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Shigeaki Nakazawa, Nobuyuki Mori, Shinsuke Nishida, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Akira Ueda, Shuichi Suzuki, Ko Furukawa, Toshikazu Nakamura, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Mikio Nakahara, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui
Implementation of Molecular Spin Quantum Computing by Pulsed Electron Magnetic Resonance Technique: Coherent ENDOR/Dual ELDOR-Based QC
Asian Conference on Quantum Information Science(AQIS2007)
September 3-6, 2007, Kyoto, Japan
198. Shinsuke Nishida, Yasushi Morita, Miki Moriguchi, Kozo Fukui, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Masaharu Satoh, Kazuhiro Nakasuji, Takeji Takui
Molecular Crystalline Secondary Battery: Multi-Electron Chargeable Ability Correlated with Redox Properties of 6-Oxophenalenoxyl-Based Neutral Radicals
7th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets(ISCOM2007)
September 24-27, 2007, Peniscola, Spain
199. Daisuke Shiomi, Kensuke Maekawa, Hiroyuki Tanaka, Mikito Nozaki, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, Takeji Takui
Bio-Inspired Molecular Magnetics: Hydrogen-Bonded Assemblages of Radical-Substituted

- Nucleobases
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
200. Kensuke Maekawa, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Naoki Shirakawa
 Magnetic Ordering in Purely Organic Radical Crystals Based on Biradical-Monoradical Composite Molecules
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
 201. Hiroyuki Tanaka, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Keiji Okada, Takeji Takui
 Crystal Structures and Magnetic Properties of Heterospin Base Pairs Based on Diaminotriazine and Uracil: A Bio-Inspired Approach
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
 202. Yuki Kanzaki, Daisuke Shiomi, Takatoshi Sawai, Kazunobu Sato, Keiji Okada, Takeji Takui
 Molecular Aggregates of m-Phenylene Substituted Nitroxide Biradicals: A Solution to Biradical Paradox
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
 203. Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Takeji Takui Japan
 An ESR/ENDOR Study of Substituted Diphenyl Nitroxide : Search for Molecular-Spin Bus Model Systems of Quantum Computers / Quantum Information Processing
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
 204. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Tomohiro Yoshino, Tomoaki Ise, Shinsuke Nishida, Nobuyuki Mori, Robabeh Rahimi, Yasushi, Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Hideyuki Hara, Patric Carl, Peter Hofer, Takeji Takui
 Magnetic Properties of Weakly-Exchange-Coupled Biradicals as Spin Qubits for Molecular-Spin Quantum Computers: Q-band Single-Crystal Pulsed ESR/ELDOR
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
 205. Kazunobu Sato, Shigeaki Nakazawa, Nobuyuki Mori, Tomoaki Ise, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Mikio Nakahara, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Hofer, and Takeji Takui
 Development of A Coherent-Dual ELDOR Spectrometer for Implementation of Molecular-Spin Quantum Computers
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
 206. Nobuyuki Mori, Hirokazu Sakamoto, Takefumi Okauchi, Kazunobu Sato, Kazuo Toyota, Daisuke Shimoi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, and

- Takeji Takui
 Quasirelativistic DFT calculations of magnetic tensors for $^{63}\text{Cu(II)}$ octaethylporphyrin:
 Strong metal-ligand covalency
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th
 Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
207. Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui
 Ab initio Calculations of Spin-Spin Contributions to the Zero-Field Splitting Tensors of
 Organic Molecules
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th
 Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
208. Takatoshi Sawai, Yuki Kanzaki, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, and Takeji
 Takui
 Molecular Structure of Biphenyl Based Nitronyl Nitroxide Biradical; CW-ESR Spectral
 Simulation with a Theoretical Spin-Hamiltonian Approach
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th
 Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
209. Teruaki Koto, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Koichi Itoh, Edel Wasserman,
 Takeji Takui
 Complete Analyses of Organic-Glass Lineshape-Distorted ESR Spectra of the First Quintet
 Aromatic Oligocarbene and High-Spin Nitrenes
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th
 Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
210. Shinsuke Nishida, Yasushi Morita, Nozomi Oguchi, Kozo Fukui, Kazunobu Sato, Kazuhiro
 Nakasuji, Takeji Takui
 Novel Homo-Spin Diradical System Based on 6-Oxophenalenoxyl Stable Neutral Radical:
 Electronic Spin Structure and Multi-Step Redox Ability
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th
 Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
211. Kanako Ogasawara, Akira Ueda, Kozo Fukui, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Tomohiro
 Yoshino, Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Yasushi Morita, Kazuhiro
 Nakasuji
 Bowl-Shaped p-Extended Semiquinone Radicals: Electronic Spin Structures of Ion Pairs with
 Alkaline-Metal Ions
 A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th
 Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology
 (ISESS-SEST2007)
 November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
212. Nobuyuki Mori, Hirokazu Sakamoto, Takafumi Okauchi, Kazunobu Sato, Kazuo Toyota,
 Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell and
 Takeji Takui
 Quasirelativistic DFT calculations for magnetic tensors of $^{63}\text{Cu(II)}$ octaethylporphyrin:
 Strong metal-ligand covalency
 The 2nd Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium for Theoretical/Computational Chemistry
 December 7-9, 2007, Kyoto, Japan

213. イミダゾールの鎖状連結体が形成する三重らせん型金属錯体とその多次元ネットワーク構造. 焼山佑美・村田剛志・森田 靖・中筋一弘. 第3回ホスト・ゲスト化学シンポジウム. 2008年5月31日～6月1日、上智大学. 口頭発表
214. 杉崎 研司、豊田 和男、佐藤 和信、塩見 大輔、工位 武治. スピン三重項有機分子の零磁場分裂テンソルにおけるスピン軌道項の量子化学計算/ 第11回理論化学討論会, 2008/5/22-24、慶応大学、神奈川県横浜市.
215. Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui, "An ab initio Approach to Spin-Spin Contributions to the Zero-Field Splitting Tensors of Organic Molecules: Calculations of Various Types of Triplet Diradicals", The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
216. Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, "A Single-Crystal ESR/ENDOR Study of Diphenyl Nitroxide Derivatives: Search of Molecular-Spin Bus Systems for Quantum Computers", The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
217. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Nobuyuki Mori, Yasushi, Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui "Magnetic Tensors of Weakly Exchange-Coupled Biradicals as Model Systems of Molecular Electron-Spin Quantum Operations", The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
218. Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Shigeaki Nakazawa, Tomoaki Ise, Shinsuke Nishida, Tomohiro Yoshino, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Mikio Nakahara, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, "Molecular-Spin Quantum Manipulation by Pulsed Electron Magnetic Resonance: pulsed ENDOR- and Coherent Dual ELDOR-QC", The 8th Asian Conference on Quantum Information Science, August 25-31, 2008, KIAS, Seoul, Korea.
219. Kazunobu Sato, Shigeaki Nakazawa, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Mikio Nakahara, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, "Implementation of Quantum Operation by Pulsed Electron Magnetic Resonance Technique for Molecular-Spin Quantum Computers", The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
220. ジフェニルニトロキシドの単結晶パルス ESR/HYSCORE と量子状態制御—量子ビットゲートの可能性.
文部一希・佐藤和信・西田辰介・中澤重顕・Robabeh Rahimi・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・中原幹夫・原英之・Patrick Carl・Peter Höfer・工位武治.
第47回 電子スピンサイエンス学会年会. 2008年10月1日～3日、九州大学、口頭発表
221. 位相制御型パルス ELDOR 法を用いた分子電子スピンの2量子演算.
中澤重顕・佐藤和信・吉野共広・伊瀬智章・西田辰介・森 展之・Robabeh Rahimi・森田 靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・中筋一弘・原 英之・Patrick Carl・Peter Hofer・工位武治
第47回 電子スピンサイエンス学会年会. 2008年10月1日～3日、九州大学、口頭発表
222. パルス ESR/ENDOR 法を用いた電子スピンバス量子コンピュータモデル分子ジフェニルニトロキシドの電子構造の解明と量子情報処理への応用.
吉野共広・西田辰介・中澤重顕・佐藤和信・Robabeh Rahimi・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治.
第47回 電子スピンサイエンス学会年会. 2008年10月1日～3日、九州大学、口頭発表
223. 分子結晶性二次電池: 有機分子を正極活物質に用いた二次電池の開発.
森田 靖・西田辰介・芥川奈緒・佐藤正春・工位武治.
第19回基礎有機化学討論会. 2008年10月3日～5日、大阪大学、口頭発表
224. 縮合多環型中性ラジカルの σ -結合型二量体構造と動的挙動: オキソフェナレンジオキシルの合成と性質.

- 鈴木修一・森田 靖・吉田健太・福井晃三・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・中筋一弘。
第19回基礎有機化学討論会。2008年10月3日～5日、大阪大学、口頭発表
225. Electronic Structure of Diphenyl Nitroxide Derivative As a Molecular-Spin Bus Model for Three-Qubit Based Quantum Operations using Pulsed ESR/ENDOR Techniques, Yoshino, T.; Nishida, S.; Shigeaki, N.; Sato, K.; Rahimi, R.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takeji Takui, T. IV International Conference “Highspin Molecules and Molecular Magnets” 2008年10月14日～19日、Yekaterinburg、ロシア、口頭発表
226. Designs and Synthetic Strategies for Novel Biradical Systems: Redox-based Spin Diversity in a 6-Oxophenalenoxyl-based Biradical and g-Engineering for Molecular-spin Quantum Computing, Nishida, S.; Ise, T.; Yoshino, T.; Nakazawa, S.; Mori, N.; Sato, K.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. IV International Conference “Highspin Molecules and Molecular Magnets” 2008年10月14日～19日、Yekaterinburg、ロシア、口頭発表
227. 分子結晶性二次電池: π 電子系有機分子の二次電池活物質への応用。
西田辰介・森田 靖・芥川奈緒・佐藤正春・工位武治
第94回 有機合成シンポジウム2008年11月7日～8日、早稲田大学、口頭発表予定
228. 温度に依存した連続的な色調変化: 縮合多環型構造を有する安定ラジカルの動的構造変化
鈴木修一、森田 靖、福井晃三、中澤重顕、北川 宏、岸田英夫、岡本 博、内藤 晶、関根あき子、大橋祐二、城 始勇、佐々木勝成、塩見大輔、佐藤和信、工位武治、中筋一弘。
第94回 有機合成シンポジウム。2008年11月7日～8日、早稲田大学、口頭発表予定
229. 杉崎 研司・豊田 和男・佐藤 和信・塩見 大輔・工位 武治
零磁場分裂テンソルのスピン軌道項の量子化学計算(阪市大院理)、(1032): 2A4-05、日本化学会第89春季年会、2009年3月27日～30日、日本大学理工学部船橋キャンパス
230. 猪口 大輔・松本 幸三・平尾 泰一・蔵田 浩之・佐藤 和信・工位 武治・久保 孝史
(3442): 4E1-18
ピリジニルラジカルを基盤とした拡張トリメチレンメタンビラジカルの合成と同定(阪大院理・阪市大院理)、日本化学会第89春季年会、2009年3月27日～30日、日本大学理工学部船橋キャンパス
231. 山中 あずさ・森田 靖・西田 辰介・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘
1,6-ジチアピレン置換 6-オキソフェナレノキシル安定中性ラジカル: 分子内電子移動の実験的解明と理論的考察(阪大院理)、(3443): 4E1-19、日本化学会第89春季年会、2009年3月27日～30日、日本大学理工学部船橋キャンパス
232. 横山 正幸・森田 靖・上田 顕・西田 辰介・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘
電子受容性官能基を導入したトリオキソトリアンギュレン誘導体の合成とレドックス能(阪大院理・阪市大院理・福井工大)、(3451): 4E1-27、日本化学会第89春季年会、2009年3月27日～30日、日本大学理工学部船橋キャンパス
233. 山本 陽介・森田 靖・上田 顕・西田 辰介・伊瀬 智章・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘、(3452): 4E1-28
メキシキ基を有するトリオキソトリアンギュレン誘導体の結晶構造と磁氣的性質(阪大院理・阪市大院理・福井工大)、日本化学会第89春季年会、2009年3月27日～30日、日本大学理工学部船橋キャンパス
234. 上田 顕・森田 靖・鈴木 修一・小寄 正敏・岡田 恵次・西田 辰介・伊瀬 智章・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘
ヘリセン型の巨大 π 電子系を有する安定開殻有機分子の合成と性質(阪大院理・阪市大院理・福井工大)、(3453): 4E1-29、日本化学会第89春季年会、2009年3月27日～30日、日本大学理工学部船橋キャンパス
235. 倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・宮崎 裕司・稲葉 章・岡田 恵次

- ラジカル置換ラジカルカチオン種を基盤とする分子磁性体の研究(阪市大院理・阪大院理)
(3463): 4E1-34、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学
部船橋キャンパス
236. 江崎 俊朗・倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・宮
崎 裕司・稲葉 章・岡田 恵次
酸素架橋トリフェニルアミンラジカルカチオン臭化鉄塩の構造と磁氣的性質に及ぼすカルコ
ゲン原子の導入効果、(3464): 4E1-35、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～
30 日、日本大学理工学部船橋キャンパス
237. 吉野 共広・西田 辰介・中澤 重顕・佐藤 和信・Rahimi, Robabeh・豊田 和男・塩見 大
輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治
単結晶 CW/Pulsed-ENDOR 法を用いたジフェニルニトロキシド誘導体の電子／分子構造
の解明: 量子情報操作を目的とする分子スピンプラス 3 量子ビット系の構築、4271): 4E4-01、
日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャン
パス
238. 伊瀬 智章・中澤 重顕・吉野 共広・森 展之・西田 辰介・佐藤 和信・豊田 和男・塩見
大輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治
g-engineering アプローチを用いた電子-電子スピン系 QC 分子の合成開発及び希釈単結
晶の探索、4272): 4E4-02、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本
大学理工学部船橋キャンパス
239. 文部 一希・佐藤 和信・伊瀬 智章・中澤 重顕・森田 靖・豊田 和男・塩見 大輔・北川
勝浩・工位 武治
CW 及びパルス ESR 分光法による弱交換相互作用系ピラジカルの電子状態の研究、
(4273): 4E4-03、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学
部船橋キャンパス
240. 佐藤 和信・文部 一希・伊瀬 智章・中澤 重顕・森田 靖・豊田 和男・塩見 大輔・北川
勝浩・工位 武治
弱交換相互作用系 QC モデルピラジカルの二次元 FT-ESR スペクトル、(4274): 4E4-04、
日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャン
パス
241. 中澤 重顕・佐藤 和信・吉野 共広・伊瀬 智章・西田 辰介・森 展之・RAHIMI,
Robabeh・森田 靖・豊田 和男・塩見 大輔・北川 勝浩・中筋 一弘・原 英之・CARL,
Patrik・HOFER, Peter・工位 武治
2 量子演算のための弱交換相互作用系ピラジカル Qubit、3E7-06、日本化学会第 89 春季
年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャンパス
242. 神崎 祐貴・塩見 大輔・佐藤 和信・岡田 恵次・工位 武治
かさ高い置換基を導入したニトロニルニトロキシドピラジカルの分子構造と分子内交換相互
作用の相関、(4911): 3E7-08、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日
本大学理工学部船橋キャンパス
243. 前川 健典・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・中谷 和彦、ナフチリジン置換ニトロニ
ルニトロキシドラジカルの合成とミスマッチ DNA への結合評価、(9046): 2J3-08*、日本化学
会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャンパス
244. 杉崎 研司・豊田 和男・佐藤 和信・塩見 大輔・工位 武治、スピン五重項基底状態を持
つ m-phenylenedinitrene の異性化反応経路の理論的研究、2009 年 5 月 28 日
245. 森田 靖、中性開殻有機分子の分子内自由度設計、新学術領域研究「分子自由度」5a,b +
 α 合同班会議、2009 年 6 月 9 日～10 日、熱海
246. Sato, K.; Nakazawa, S.; Rahimi, R.; Ise, T.; Nishida, S.; Yoshino, T.; Yakiyama, Y.; Toyota,
K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Nakahara, M.; Hara, H.; Carl, P.;
Höfer, P.; Takui, T. Molecular-Spin Quantum Computers by Pulsed Electron Magnetic

- Resonance Technique: Chemist's Materials Challenge for A Lloyd's Model, 9th Asian Conference on Quantum Information Science, 2009年8月26日～29日、中国 南京
247. 中澤重顕、佐藤和信、吉野共広、伊瀬智章、西田辰介、森 展之、R. D. Rahimi、森田 靖、豊田 和男、塩見大輔、北川勝浩、中筋一弘、原 英之、P. Carl、P. Hofer、工位武治、弱交換相互作用系ビラジカル Qubit の磁氣的パラメータとパルス CD-ELDOR 法による電子スピン2量子演算、第3回分子科学討論会、2009年9月21日～24日、名古屋大学
248. 文部一希・佐藤和信・伊瀬智章・杉崎研司・中澤重顕・森田 靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・工位武治、CW 及びパルス ESR 法による弱交換相互作用系ビラジカルの電子状態の研究、第3回分子科学討論会、2009年9月21日～24日、名古屋大学
249. 吉野共広・西田辰介・中澤重顕・佐藤和信・Rahimi Robabeh・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治、分子スピン QC バス系の量子情報制御を目指した DPNO-d8 の単結晶 ESR/ENDOR 法による研究、第3回分子科学討論会、2009年9月21日～24日、名古屋大学
250. 伊瀬智章・中澤重顕・西田辰介・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・森田 靖・北川勝浩・工位武治、電子-電子スピン系分子スピン QC を目指した弱交換相互作用系ジラジカルの設計と磁氣的希釈単結晶の開発、第3回分子科学討論会、2009年9月21日～24日、名古屋大学
251. 田中 啓之、塩見 大輔、松尾 保孝、新倉 謙一、居城 邦治、佐藤 和信、工位 武治、核酸塩基の相補的な塩基対形成を利用した溶液中および気水界面での分子スピン集合体の構築、2009年9月21日～24日、名古屋大学
252. 杉崎研司・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・工位武治、基底一重項カルベンの電子的励起状態に関する理論的研究、2009年9月21日～24日、名古屋大学
253. 焼山佑美・森田 靖・村田剛志・伊瀬智章・中澤重顕・橋爪大輔・塩見大輔・佐藤和信・北川勝浩・中筋一弘・工位武治、拡張性を有する物質スピン量子ビットへの挑戦: オリゴイミダゾールから成る三重らせん型金属錯体の磁氣的希釈単結晶の合成とその電子スピン構造、第20回基礎有機化学討論、2009年9月28日～30日、群馬大学工学部
254. 中澤重顕・佐藤和信・吉野共広・伊瀬智章・西田辰介・森 展之・Robabeh Rahimi・森田 靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・中筋一弘・原英之・Patrick Carl・Peter Hofer・工位武治、2量子演算のためのビラジカル Qubit-単結晶パルスELDOR法による弱交換相互作用系ビラジカルの双極子及び交換相互作用の決定、第48回電子スピンサイエンス学会年会 (SEST2009)、2009年11月10日～12日、神戸大学百年記念館
255. 吉野共広・西田辰介・中澤重顕・佐藤和信・Robabeh Rahimi・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治、パルスENDORを用いた分子スピンバス量子コンピュータモデル系の量子エンタングルド状態の生成と評価、第48回電子スピンサイエンス学会年会 (SEST2009)、2009年11月10日～12日、神戸大学百年記念館
256. 文部一希・佐藤和信・伊瀬智章・杉崎研司・中澤重顕・森田 靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・工位武治、弱交換相互作用ビラジカルの2次元電子スピンニューテーションスペクトルと電子状態の研究、第48回電子スピンサイエンス学会年会 (SEST2009)、2009年11月10日～12日、神戸大学百年記念館
257. 杉崎研司・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・工位武治、零磁場分裂テンソルのスピン軌道項の量子化学計算: 高スピン有機分子への応用、第48回電子スピンサイエンス学会年会 (SEST2009)、2009年11月10日～12日、神戸大学百年記念館
258. 野崎 幹人¹、中澤 重顕、杉崎 研司、佐藤 和信、塩見 大輔、豊田 和男、Aaron S. Micallef, Graeme R. Hanson, 北川 勝浩, 工位 武治, 金属内包フタロシアニン正方対称場におけるテトラニトロキンドラジカルの交換相互作用—2次元量子ビットモデル系の構築を目指して—、第48回電子スピンサイエンス学会年会 (SEST2009)、2009年11月10日～12日、神戸大学百年記念館

259. 神崎祐貴、塩見大輔、沢井隆利、中澤重頭、佐藤和信、岡田恵次、工位武治、パルス電子-電子二重共鳴法によるクラウンエーテル置換ニトロキシドビラジカルの分子構造の研究, 第48回電子スピンサイエンス学会年会 (SEST2009), 2009年11月10日~12日、神戸大学百年記念館
260. Nishida, S.; Morita, Y.; Akutagawa, N.; Satoh, M.; Takui, T. New Chemical Approach to High-performance Secondary Batteries Based on Organic Open- and Closed-shell Molecules with Mutli-stage Redox Abilities, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日~18日、淡路夢舞台国際会議場
261. Ise, T.; Nakazawa, S.; Nishida, S.; Sato, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. Molecular Designs and Syntheses of a Series of Electron Spin-qubit Molecules to Establish a g-Engineering Based Synthetic Strategy for MSQC, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日~18日、淡路夢舞台国際会議場
262. Yoshino, T.; Nishida, S.; Nakazawa, S.; Sato, K.; Rahimi, R.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. Generation and Characterization of Quantum Entanglements in A Molecular Spin for Electron Spin-Bus Quantum Computers by Pulsed ENDOR Spin Technology, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日~18日、淡路夢舞台国際会議場
263. S.; Sato, K.; Rahimi, R.; Yoshino, T.; Nishida, S.; Ise, T.; Mori, N.; Morita, Y.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Nakasuji, K.; Kitagawa, M.; Hara, H.; Carl, P.; Höfer, P.; Takui, T. Weakly Exchange-Coupled Biradicals as Electron Two-Qubit Systems: Determination of the Spin Dipolar and Exchange Interactions by Single-Crystal ELDOR Experiments, Nakazawa, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日~18日、淡路夢舞台国際会議場
264. 文部 一希・佐藤 和信・伊瀬 智章・杉崎 研司・中澤 重頭・森田 靖・豊田 和男・塩見 大輔・北川 勝浩・工位 武治, CW/パルスESR法による弱交換相互作用TEMPOビラジカルの電子状態, 2010年3月26日, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
265. 野崎 幹人・中澤 重頭・杉崎 研司・佐藤 和信・塩見 大輔・豊田 和男・Micallef, Aaron,S・Hanson, Graeme,Richard・北川 勝浩・工位 武治, 正方対称テトラニトロキシドラジカルの弱交換相互作用—金属内包フタロシアニン骨格を活用した2次元量子ビットモデル系のプロトタイプとして—, 2010年3月26日, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
266. 吉野 共広・西田 辰介・中澤 重頭・佐藤 和信・RAHIMI, Robabeh・豊田 和男・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治, 分子スピンバス系DPNO-d8における量子エンタングルメント状態の生成と評価, 2010年3月26日, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
267. 伊瀬 智章・中澤 重頭・西田 辰介・佐藤 和信・塩見 大輔・森田 靖・北川 勝浩・工位 武治, g及びAエンジニアリングを用いた物質系qubitの合成開発, 2010年3月26日, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
268. 杉崎 研司・豊田 和男・佐藤 和信・塩見 大輔・工位 武治, 有機高スピン分子の零磁場分裂テンソルのスピン軌道項の量子化学計算, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
269. 厚見 宙志・前川 健典・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・中谷 和彦, 核酸の機能化を目指したスピン含有DNA認識分子の創成及び評価, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
270. 古井 孝宜・倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡田 恵次, ニトロニルニトロキシド-ニトロキシド直接連結型高スピン安定ジラジカルの構造と磁氣的性質, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
271. 古井 孝宜・倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡田 恵次, 安定化フェニルニトロキシド置換ニトロニルニトロキシドジラジカルの構造と磁気

- 物性, 熊谷 祐・鈴木 修一・倉津 将人・小嵯 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡田 恵次, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
272. 上田 顕・森口 実紀・福井 晃三・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘・森田 靖, トリオキソトリアンギュレン中性ラジカルの結晶状態における動的電子スピン物性, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
273. 村田 剛志・上田 顕・仮屋 和貴・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・森田 靖, トリオキソトリアンギュレン型中性ラジカルに対する置換基効果:ハロゲン置換体の合成と物性, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
274. 仮屋 和貴・上田 顕・村田 剛志・佐藤 和信・工位 武治・森田 靖, トリオキソトリアンギュレン型中性ラジカルに対する置換基効果:n-ブトキシ置換体の合成と物性, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
275. 永田 充輝・鈴木 修一・倉津 将人・小嵯 正敏・佐藤 和信・工位 武治・岡田 恵次, トリ-*t*-ブチルニトロキシド置換トリオキソトリフェニルアミンおよびその一電子酸化体の合成研究, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
276. 焼山 佑美・村田 剛志・松井 佑実子・橋爪 大輔・伊瀬 智章・中澤 重頭・塩見 大輔・佐藤 和信・中筋 一弘・工位 武治・森田 靖, 三重らせん構造を形成するオリゴイミダゾール金属錯体の合成と光学分割, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
277. 神崎 祐貴・塩見 大輔・沢井 隆利・中澤 重頭・佐藤 和信・岡田 恵次・北川 勝浩・工位 武治, クラウンエーテル置換ニトロニルニトロキシドピラジカルの長鎖型超分子構造の評価: パルス電子-電子二重共鳴(pulsed ELDOR)法の超分子化学への適用, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
278. 岡田 翔・塩見 大輔・神崎 祐貴・宮崎 裕司・稲葉 章・田中 里佳・佐藤 和信・工位 武治, らせんキラリティを持つ有機ラジカル結晶の強磁性相転移, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
279. 中澤 重頭・佐藤 和信・吉野 共広・伊瀬 智章・西田 辰介・森 展之・RAHIMI, Robabeh・森田 靖・豊田 和男・塩見 大輔・北川 勝浩・中筋 一弘・原 英之・CARL, Patrik・HOFER, Peter・工位 武治, 弱交換相互作用系ピラジカルQubitの電子スピン量子演算とデコヒーレンス時間, 日本化学会第90春季年会, 近畿大学
280. T. Yoshino (Osaka City Univ.), S. Nishida, S. Nakazawa, K. Sato, R. D. Rahimi, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, M. Kitagawa, and T. Takui, "Characterization of Quantum Entanglements in Diphenyl Nitroxide Radicals by Pulsed ENDOR Spectroscopy with TPPI Technique", V International Conference on HIGH-SPIN MOLECULES AND MOLECULAR MAGNETS and IV Russian-Japanese Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices", Nizhny Novgorod, Russian Federation. 2010.09.07, oral.
281. K. Sugisaki (Osaka City Univ.), K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, P. M. Lahti, M. Kitagawa, and T. Takui, "Theoretical Approaches to the Zero-Field Splitting Tensors of Organic High-Spin Systems: Applications to The Spin-Quartet State of Nitrene-Radical Linkages", V International Conference on HIGH-SPIN MOLECULES AND MOLECULAR MAGNETS and IV Russian-Japanese Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices", Nizhny Novgorod, Russian Federation. 2010.09.06, oral.
282. Kazunobu Sato (Osaka City Univ.), Tomohiro Yoshino, Shigeaki Nakazawa, Robabeh Rahimi, Ayaka Tanaka, Tomoaki Ise, Shinsuke Nishida, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, "Quantum Manipulation of Molecular Spin Qubits for Quantum Computing by Pulsed Electron Multiple Resonance Technique", V International Conference on HIGH-SPIN MOLECULES AND MOLECULAR MAGNETS and IV Russian-Japanese Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices", Nizhny Novgorod, Russian Federation. 2010.09.06, oral.
283. S. Nishida (Osaka Univ.), Y. Morita, K. Sato and T. Takui, "Generality of Redox-Based Spin Diversity in Odd-Alkternant pi-Conjugation Systems", V International Conference on

- HIGH-SPIN MOLECULES AND MOLECULAR MAGNETS and IV Russian-Japanese Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices", Nizhny Novgorod, Russian Federation. 2010.09.06, oral.
284. S. Nakazawa (Osaka City Univ.), K. Sato, R. D. Rahimi, T. Yoshino, S. Nishida, T. Ise, N. Mori, Y. Morita, K. Toyota, D. Shiomi, K. Nakasuji, M. Kitagawa, H. Hara, P. Carl, P. Höfer, and T. Takui, "Quantum Operation for Synthetic Electron Spin-Qubits", V International Conference on HIGH-SPIN MOLECULES AND MOLECULAR MAGNETS and IV Russian-Japanese Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices", Nizhny Novgorod, Russian Federation. 2010.09.06, oral.
285. Y. Kanzaki (Osaka City Univ.), D. Shiomi, T. Sawai, K. Sato, K. Okada and T. Takui, "One-Dimensional Molecular Self-Association of m-Phenylene Substituted Nitroxide Biradicals: A Solution to Biradical Paradox", V International Conference on HIGH-SPIN MOLECULES AND MOLECULAR MAGNETS and IV Russian-Japanese Workshop on "Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices", Nizhny Novgorod, Russian Federation. 2010.09.06, oral.
286. 杉崎 研司 (大阪市大・院・理), 豊田 和男, 佐藤 和信, 塩見 大輔, Paul M. Lahti, 工位 武治, ナイトレン-ラジカル連結分子のスピン四重項状態の零磁場分裂テンソルの理論的研究, 第 13 回理論化学討論会, 北海道大学. 2010.05.25, 口頭発表。
287. 村田剛志(大阪大学・院・理)・神崎裕貴・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・森田 靖, トリオキソトリアンギュレンを基盤とするスピン非局在型中性ラジカルの開発:ハロゲン誘導体の合成と置換基効果, 第 21 回基礎有機化学討論会, 名古屋大学, 2010 年 9 月 9 日~11 日. 2010.09.09, 口頭発表。
288. 神崎祐貴(大阪市大・院・理), 塩見大輔, 沢井隆利, 佐藤和信, 岡田恵次, 工位武治, ニトロキシドビラジカルにおけるビラジカルパラドックス: 溶液中の自己会合度の定量的解析, 第 4 回分子科学討論会(Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010), 大阪大学豊中キャンパス, 2010 年 9 月 14 日~17 日. 2010.09.14, 口頭発表。
289. 中澤重頭(大阪市大・院・理)、佐藤和信、吉野共広、伊瀬智章、西田辰介、森展之、R. D. Rahimi、森田靖、豊田和男、塩見大輔、北川勝浩、中筋一弘、原英之、P. Carl、P. Hofer、工位武治、分子スピン量子ビットによる量子演算、第 4 回分子科学討論会(Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010), 大阪大学豊中キャンパス, 2010 年 9 月 14 日~17 日. 2010.09.14、口頭発表。
290. 吉野共広(大阪市大・院・理), 西田辰介, 中澤重頭, 佐藤和信, Robabeh Rahimi, 豊田和男, 塩見大輔, 森田 靖, 北川勝浩, 工位武治, パルス ENDOR 法を用いた分子スピンバス系 DPNO-d8 における電子-核スピン量子ビット制御, 第 4 回分子科学討論会(Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010), 大阪大学豊中キャンパス, 2010 年 9 月 14 日~17 日. 2010.09.14, 口頭発表。
291. 杉崎研司(大阪市大・院・理)・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・Paul M. Lahti・工位武治, ナイトレン-ラジカル連結分子の零磁場分裂テンソルの第一原理計算, 第 4 回分子科学討論会(Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010), 大阪大学豊中キャンパス, 2010 年 9 月 14 日~17 日. 2010.09.14, 口頭発表。
292. 文部一希(大阪市大・院・理)・佐藤和信・伊瀬智章・西田辰介・杉崎研司・中澤重頭・森田靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・工位武治, 弱交換相互作用ビラジカル系の電子スピンニューテーション運動と電子状態, 第 4 回分子科学討論会(Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010), 大阪大学豊中キャンパス, 2010 年 9 月 14 日~17 日, 2010.09.15, 口頭発表。
293. 野崎 幹人(大阪市大・院・理), 中澤 重頭, 西田 辰介, 杉崎 研司, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 豊田 和男, Aaron S. Micallef, Graeme R. Hanson, 森田 靖, 北川 勝浩, 工位 武治, 金属フタロシアニンを基盤とする正方対称テトラニトロキシドラジカルの多電子間交換相互作用: 電子スピン量子ビットによる量子シミュレータの構築を目指して, 第 4 回分子科学討論会(Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010), 大阪大学豊中キ

キャンパス, 2010年9月14日~17日. 2010.0915, 口頭発表。

294. 佐藤和信(大阪市大・院・理), 原雄太, 吉田健太, 鈴木修一, 上田顕, 森田靖, 豊田和男, 塩見大輔, 岡田恵次, 中筋一弘, 工位武治, ヘキサメキシフェナレニルの高分解能溶液 ESR スペクトルと電子状態, 第4回分子科学討論会(Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010), 大阪大学豊中キャンパス, 2010年9月14日~17日. 2010.0915, 口頭発表。

【小澤 G】

295. M. Hotta, T. Karasawa, and M. Ozawa, Ancilla-Assisted Enhancement of Channel Estimation for Low-Noise Parameters, Workshop on Theory of Quantum Computation, Communication and Cryptography (TQC2006), Atsugi, Japan, February 23, 2006.
296. M. Ozawa, Noise and disturbance in quantum measurements and operations, SPIE International Defense and Security Symposium, Orlando, USA, April 18, 2006.
297. M. Hotta, T. Karasawa, and M. Ozawa, Ancilla-Assisted Enhancement of Channel Estimation for Low-Noise Parameters, Conference on Quantum Information and Quantum Control II, Toronto, Canada, August 9, 2006.
298. M. Hotta, T. Karasawa, K. Matsumoto, and M. Ozawa, Low-Noise Channel Estimation, The Eighth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC2006), Tsukuba, Japan, November 30, 2006.
299. 堀田 昌寛、唐澤 時代、小澤 正直, 低ノイズパラメータのアンシラ系との量子もつれを用いた推定改良、第14回非平衡系の統計物理シンポジウム、筑波大学、2006年1月25日。
300. 堀田昌寛、唐澤時代、小澤正直、N体拡張された低ノイズチャンネル推定、第15回量子情報技術研究会(QIT15)、京都、2006年11月21日。
301. 唐澤時代、小澤正直、保存法則によって誘導される量子 NOT 演算の精度限界について、第15回量子情報技術研究会(QIT15)、京都、2006年11月21日。
302. J. Gea-Banacloche and M. Ozawa, Minimum Energy Pulses for Quantum Logic Cannot Be Shared, CLEO/QELS and PhAST 2007, Baltimore, USA, May 10, 2007.
303. T. Karasawa, M. Ozawa, J. Gea-Banacloche, and K. Nemoto, Minimum Error Probabilities for Single Qubit Gates Constrained by Conservation Laws, Asian Conference on Quantum Information Science (AQIS2007), Kyoto, Japan, September 6, 2007.
304. T. Karasawa and M. Ozawa, Quantum Precision Limits Given by the Gate Trace Distance and the Gate Fidelity, Workshop on Theory of Quantum Computation, Communication and Cryptography (TQC2007), Nara, Japan, January 25, 2007.
305. M. Ozawa, “Universal Uncertainty Principle and Simultaneous Measurability of Non-commuting Observables,” Noise Information & Complexity @ Quantum Scale (Erice, Italy) (November 5, 2007).
306. 小澤正直、西村治道、量子 Turing 機械の停止問題、日本数学会秋季総合分科会、仙台、2007年9月24日。
307. Masanao Ozawa, Conservation Laws Limit Quantum Control Accuracy, Quorpe Workshop Quantum/Classical Control in Quantum Information: Theory and Experiments (QCCQI2008), Otranto, Italy, September 14, 2008.
308. 唐澤時代、小澤正直、根本香絵、保存法則によって引き起こされる単一量子ビットゲートの最小誤差の研究、日本物理学会、大阪、2008年3月26日。
309. 木村元、B.K. Meister、小澤正直、乗法的保存量が課す量子測定の限界について: Wigner-Araki-Yanase 定理の拡張、日本物理学会、大阪、2008年3月26日。
310. 唐澤時代、小澤正直、J. Gea-Banacloche、根本香絵、保存法則によって誘導される任意の単一量子ビット演算に対する精度限界、第20回量子情報技術研究会、広島、2009年5月21日。
311. 小澤正直、J. Gea-Banacloche、New Formulation of Complementarity、RIMS 共同研究・基研研究会「量子科学における双対性とスケール」、京都、2009年11月5日。
312. 唐澤時代、小澤正直、根本香絵、複数量子ビット演算の精度限界、日本物理学会、日本物理学会、津島、2010年3月23日。

【中村 G】

313. 吉原 文樹 (理化学研究所), Khalil Harrabi, Pierre-Marie Billangeon, 中村 泰信, 蔡 兆申, “結合された2つの磁束量子ビットの位相緩和測定”, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 熊本, 9 月 25-28 日 (2009)
314. 中村 泰信 (理化学研究所/NEC), “超伝導量子ビットとマイクロ波量子エレクトロニクス”, 応用物理学会・量子エレクトロニクス研究会, 軽井沢, 1 月 8 日 (2010)
315. 猪股 邦宏 (理化学研究所), 渡部 道生, 山本 剛, 中村 泰信, 蔡 兆申, “超伝導マイクロ波共振器を用いた磁束量子ビットの非破壊読み出し”, 日本物理学会 2010 年年会, 岡山, 3 月 23-26 日 (2010)
316. J. Bylander (MIT), S. Gustavsson, F. Yoshihara, K. Harrabi, Y. Nakamura, J.S. Tsai, W. D. Oliver, “Long coherence time in a superconducting persistent-current qubit”, 2010 APS March Meeting, Portland, USA, March 15-19 (2010)
317. S. Gustavsson (MIT), J. Bylander, F. Yoshihara, K. Harrabi, Y. Nakamura, J.S. Tsai, W. D. Oliver, “A superconducting flux qubit with tunable tunnel coupling”, 2010 APS March Meeting, Portland, USA, March 15-19 (2010)
318. E. P. Menzel (Walther-Meissner-Institut/TU München), M. Mariani, F. Deppe, M. A. Araque Caballero, A. Baust, E. Hoffmann, T. Niemczyk, A. Marx, R. Gross, E. Solano, T. Yamamoto, K. Inomata, and Y. Nakamura, “Dual-path measurements of propagating microwave signals at the quantum level for circuit QED”, 2010 APS March Meeting, Portland, USA, March 15-19 (2010)
319. J. Bylander (MIT), S. Gustavsson, F. Yoshihara, K. Harrabi, Y. Nakamura, J.S. Tsai, W. D. Oliver, “Long coherence time in a superconducting persistent-current qubit”, Applied Superconductivity Conference (ASC2010), Washington DC, USA, August 1-6 (2010)
320. 中村 泰信 (理化学研究所/NEC), “超伝導量子回路におけるマイクロ波量子光学”, 最先端研究開発量子情報処理プロジェクト 夏期研修会, 南城, 8 月 23 日 (2010)
321. 吉原 文樹 (理化学研究所), 中村 泰信, 蔡 兆申, “磁束量子ビットのラビ振動の緩和率測定による磁束ノイズの評価”, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 堺, 9 月 23-26 日 (2010)
322. 越野 和樹 (東京医歯大), 石坂 智, 中村 泰信, “ Λ 型三準位系を用いた決定論的光子-光子(SWAP)^{1/2}ゲート”, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 堺, 9 月 23-26 日 (2010)

③ ポスター発表 (国内会議 143 件、国際会議 228 件)

【北川 G】

1. Weng Kung Peng, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, A new technique for cross polarization compatible with high spinning frequencies and high magnetic fields, The 1st Asia Pacific NMR Symposium (第 44 回 NMR 討論会 - 第一回アジア太平洋 NMR シンポジウム合同会議), Yokohama, Japan, 2005/11/8-11
2. Munehiro Inukai, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, MQMAS with strong RF pulses using a microcoil, 1st Asia Pacific NMR Symposium (第 44 回 NMR 討論会 - 第一回アジア太平洋 NMR シンポジウム合同会議), Yokohama, Japan, 2005/11/8-11
3. K. Takeda, A. Kagawa, Determination of a spin diffusion coefficient by triplet-DNP, 1st Asia Pacific NMR Symposium (第 44 回 NMR 討論会 - 第一回アジア太平洋 NMR シンポジウム合同会議), Yokohama, Japan, 2005/11/8-11
4. Shogo Yamana, Kazuyuki Takeda and Masahiro Kitagawa, 1-qubit operation in solid-state NMR under Lee-Goldburg irradiation, 第 13 回量子情報技術研究会, 2005 年 11 月 24 日、仙台市
5. M. Inukai, K. Takeda, Studies on MQMAS with strong RF pulses using a microcoil, 47th ENC (Experimental NMR Conference), Asilomar Conference Center, Pacific Grove, CA, USA, (2006), 4/23-28.

6. K. Takeda, Single-chip NMR pulse programmer on field-programmable gate-array, 47th ENC (Experimental NMR Conference), Asilomar Conference Center, Pacific Grove, CA, USA, (2006), 4/23-28.
7. Weng Kung Peng, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, A new technique for cross polarization compatible with high spinning frequencies and high magnetic field, 47th ENC (Experimental NMR Conference), Asilomar Conference Center, Pacific Grove, CA, USA, (2006), 4/23-28.
8. Akinori Kagawa, Shogo Yamanaka, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Toward NMR quantum computing with high polarization by triplet-DNP, 47th ENC (Experimental NMR Conference), Asilomar Conference Center, Pacific Grove, CA, USA, (2006), 4/23-28.
9. 武田和行, Single-chip NMR pulse programmer on field-programmable gate-array, 第39回固体NMR・材料研究会/第4回固体NMRフォーラム 合同研究会, 住友ゴム工業(株)中央研究所, (2006), 5/11-12
10. 根来誠、山中祥吾、香川晃徳、武田和行、北川勝浩, Lee-Goldburg 照射を使った固体 NMR 量子計算機の操作, 20周年記念第40回固体NMR・材料研究会/第5回強磁場固体NMRフォーラム 合同研究会, 京都ガーデンパレス, (2006) 10.16-17.
11. 香川晃徳、根来誠、山中祥吾、室川遊、武田和行、北川勝浩, 光励起三重項電子スピンをを用いた動的核偏極によるNMR量子コンピュータの初期化, 20周年記念第40回固体NMR・材料研究会/第5回強磁場固体 NMR フォーラム 合同研究会, 京都ガーデンパレス, (2006) 10.16-17. 犬飼宗弘、武田和行, マイクロコイルを用いた強い RF 照射下における MQMAS の研究, 20周年記念第40回固体NMR・材料研究会/第5回強磁場固体NMRフォーラム 合同研究会, 京都ガーデンパレス, (2006) 10.16-17.
12. 犬飼宗弘、武田和行, マイクロコイルを用いた強い RF 照射下における MQMAS の研究, 20周年記念第40回固体 NMR・材料研究会/第5回強磁場固体 NMR フォーラム 合同研究会, 京都ガーデンパレス, (2006) 10.16-17.
13. Weng Kung Peng, Kazuyuki Takeda, Cross Polarization with Simultaneous Adiabatic Frequency Sweep on I and S spins, 第 45 回 NMR 討論会, 京都大学百周年時計台記念館, (2006) 11.22-24.
14. 武田和行, Packing digital circuits for an NMR spectrometer into a single chip, 第 45 回 NMR 討論会, 京都大学百周年時計台記念館, (2006) 11.22-24.
15. 根来誠、山中祥吾、香川晃徳、武田和行、北川勝浩, Universal control of a qubit system under Lee-Goldburg irradiation for solid-state NMR quantum computing, 第 45 回 NMR 討論会, 京都大学百周年時計台記念館, (2006) 11.22-24.
16. Akira SaiToh and Robabeh Rahimi, Two theorems for quick finding of entanglement in a multi-qubit density operator, (ICQFT)August 25-31, 2006, Hangzhou, China
17. Makoto Negoro, Shogo Yamanaka, Akinori Kagawa, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Universal control of nuclear spins in solids robust against decoherence, the 8th International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC 2006), Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, (2006), 11.28-12.3
18. Akira SaiToh and Masahiro Kitagawa, Solving X3HS using a matrix-product-state simulation of an extended Bruschweiler search, QCMC2006, (poster), Tsukuba, 29th November-3rd December 2006.11.28-12.3
19. Robabeh Rahimi, Kazunobu Sato, Akira SaiToh, Takeji Takui, and Mikio Nakahara, Bang-bang control of entanglement between electron and nuclear spins, QIP'07, (poster), Brisbane, Australia, 30th January-3rd February 2007.
20. Akira SaiToh and Robabeh Rahimi, Non-classical correlation in a class of separable density operators reconsidered, QIP'07, (poster), Brisbane, Australia, 30th January-3rd February 2007.
21. M. Kitagawa, A quantum universal source coding algorithm with logarithmic workspace, QIP'07, Brisbane, Australia, 30th January-3rd February 2007.
22. 荒津大輔, 格子と結合した核スピン系でのパルス操作による非マルコフ性エラー, 第 16 回量子情報技術研究会 (QIT16), NTT 厚木研究開発センタ講堂, 2007 年 5 月 17-18 日
23. Robabeh Rahimi, Akira SaiToh, and Mikio Nakahar, Bang-bang control of entanglement in

- spin-bus-boson model, Summer School on Mathematical Aspects of Quantum Computing, poster, 27-29 August 2007, Kinki University, Higashi-Osaka
24. Akira SaiToh, Robabeh Rahimi, Mikio Nakahara, and Masahiro Kitagawa, Numerical computation of time-dependent multipartite nonclassical correlation, Summer School on Mathematical Aspects of Quantum Computing, poster, 27-29 August 2007, Kinki University, Higashi-Osaka
 25. 根来誠,武田和行, DDS のイメージ周波数とスーパーナイキストサンプリングを用いたデジタル NMR 分光計の駆動周波数向上方法, 第 46 回 NMR 討論会,札幌コンベンションセンター,2007 年 9 月 11 日
 26. Akira SaiToh, Robabeh Rahimi, and Mikio Nakahara, Quantum wipe effect for coherence conservation, Asian Conference on Quantum Information Science 2007, poster, Kyoto University, Kyoto.
 27. Akira SaiToh, Robabeh Rahimi, and Mikio Nakahara, Nonclassical correlation of a multipartite quantum system: two measures and evaluation, 2nd International Workshop on Material Science and Nano-Engineering, poster, 1-5 December 2007, Awaji Yumebutai, Awaji.
 28. Weng Kung Peng, Kazuyuki Takeda, Efficient Cross Polarization with Simultaneous Adiabatic Frequency Sweep on the Source and Target Channels Applicable for Spins with Fast Relaxation, 48th ENC,Hilton Daytona Beach Oceanfront Resort, Daytona Beach, FL, USA,2007.4.22-27
 29. K. Takeda, A compact NMR spectrometer: Digital components packed inside a single chip Osaka University,Toyonaka, Japan, 48th ENC,Hilton Daytona Beach Oceanfront Resort, Daytona Beach, FL, USA,2007.4.22-27
 30. K.Takeda, OPENCORE NMR: Open-source core modules for implementing an integrated,FPGA-based NMR spectrometer, The 5th Alpine Conference on Solid-State NMR,Chamonix-Mont Blanc, France, 9-13 September 2007
 31. Akira SaiToh, Applications of the simulation of a bulk-ensemble search:evaluation of the power of an MPS simulation of an extended Bruschweiler search in solving NP problems, The 7th Canadian Summer School on Quantum Information, University of Waterloo, Canada, May 27-31,2007.
 32. Akira SaiToh, Numerical computation of time-dependent multipartite nonclassical correlation, The 7th Canadian Summer School on Quantum Information, University of Waterloo, Canada, May 27-31,2007.
 33. Robabeh Rahimi, Akira SaiToh, and Mikio Nakahara, Coherence Conservation by Quantum Wipe Effect, Noise Information & Complexity @ Quantum Scale, poster, 4-10 November 2007, Erice, Italy.
 34. Akira SaiToh, Robabeh Rahimi, and Mikio Nakahara, Evaluating measures of nonclassical correlation in a multipartite quantum system, Noise Information & Complexity @ Quantum Scale, poster, 4-10 November 2007, Erice, Italy.
 35. Robabeh Rahimi, Akira SaiToh, and Mikio Nakahara, Quantum Wipe Effect for Coherence Conservation, First International Conference on Quantum Error Correction, poster, 17-21 December 2007, University of Southern California, Los Angeles, USA.
 36. Akira SaiToh and Robabeh Rahimi, Yet another framework of a quantum noncooperative game, The 11th Workshop on Quantum Information Processing, poster, 17-21 December 2007, India International Centre, New Delhi, India.
 37. W K Peng, K Takeda,and Samoson, Large bandwidth sensitivity enhancement in paramagnetic system with Simultaneous Adiabatic Frequency Sweep on the Source and Target Channels,SADIS CP 49th ENC,California,9-14,March 2008.
 38. Munehiro Inukai,K.Takeda,Simultaneous acquisitions of cosine- and sine-modulated signals in z-filter hypercomplex 2D experiments, SADIS CP 49th ENC,California,9-14,March 2008.
 39. 香川晃徳、室川遊、武田和行、北川勝浩、部分的重水素化を用いたプロトンスピン拡散速度の制御による DNP 効率の最適化, 第 43/8 回 固体 NMR・材料フォーラム 5 月 12 日 東京大学・本郷キャンパス 山上会館
 40. 根来 誠、香川 晃徳、北川 勝浩、武田 和行, A magnetic-field cycling triplet-DNP NMR system, 第 43/8 回 固体 NMR・材料フォーラム 5 月 12 日 東京大学・本郷キャンパス 山上会館

41. Munehiro Inukai, Kazuyuki Takeda, Simultaneous acquisitions of cosine- and sine-modulated signals in z-filter hypercomplex 2D experiments, The 49th Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference, March 9-14, 2008, Asilomar Conference Center, Pacific Grove, CA, USA
42. A.Kagawa, Yu Murokawa, K. Takeda, and M. Kitagawa, Magnetic-field cycling triplet-DNP/NMR system for true quantum computation with hyperpolarized nuclear spins, Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC) 2008, 19-24 August, Calgary, Canada
43. M. Negoro, A. Kagawa, K. Takeda, and M. Kitagawa, A Magnetic Field Cycling System for True Quantum Computing with Hyperpolarization Attained by Dynamic Nuclear Polarization using Triplet Electron Spins, 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, September 29th- October 1st, 2008, Icho Kaikan, Osaka University, Osaka, Japan
44. D.Aratsu, On Entanglement Distillation and Duality between Positive Matrices and Positive Maps, 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, September 29th-October 1st, 2008, Icho Kaikan, Osaka University, Osaka, Japan
45. 根来 誠、香川 晃徳、北川 勝浩、武田 和行, A magnetic-field cycling triplet-DNP NMR system, 第 47 回 NMR 討論会、11 月 12 日～14 日、筑波大学 大学会館講堂(つくば市天王台)
46. 田渕豊, 根来誠, 岸田拓郎, 北川勝浩, 武田和行, Active compensation of RF pulse transients 能動制御によるラジオ波パルス過渡現象の補正, 第 47 回 NMR 討論会,筑波大学,2008 年 11 月 12 日
47. D.Aratsu, On Entanglement Distillation and Duality between Positive Matrices and Positive Maps, 25-28 November, International Symposium on Physics of Quantum Technology
48. Yutaka Tabuchi, Makoto Negoro, Takuro Kishida, Masahiro Kitagawa, Kazuyuki Takeda, Active Compensation of rf-Pulse Transients, 50th ENC Conference, March 29-April 3, 2009, Asilomar Conference Center, Pacific Grove, CA
49. Yutaka Tabuchi, Makoto Negoro, Takuro Kishida, Masahiro Kitagawa, Kazuyuki Takeda, "Active Compensation of rf-Pulse Transients", 50th ENC Conference, No.485, Pacific Grove, CA, USA, 29th Mar-3rd Apr, 2009.
50. 光励起三重項電子スピンを用いた動的核偏極のための部分的重水素化によるプロトン密度の最適化, 香川晃徳、室川遊、武田和行、北川勝浩, 2009 年 5 月 21・22 日, 第 20 回 量子情報技術研究会 広島大学 サタケメモリアルホール
51. 全シリコン量子コンピュータにおけるパルス照射エラー確率の非マルコフ性の計算, 荒津大輔, 2009 年 5 月 21・22 日, 第 20 回 量子情報技術研究会 広島大学 サタケメモリアルホール
52. 固体 NMR 量子計算のための磁場循環 triplet-DNP・NMR 装置, 根来 誠, 香川晃徳, 武田和行, 北川 勝浩, 2009 年 5 月 21・22 日, 第 20 回 量子情報技術研究会 広島大学 サタケメモリアルホール
53. 光励起三重項 DNP による室温での p-terphenyl 結晶におけるプロトンの高偏極化,根来 誠, 立石健一郎, 香川晃徳, 北川 勝浩,第 48 回 NMR 討論会 九州大学医学部百年講堂, 福岡, 11 月 10 日-12 日, 2009.
54. 共振器応答に基づくパルス過渡現象の全補償, 田渕 豊, 根来 誠, 武田 和行, 北川 勝浩, 第 48 回 NMR 討論会 九州大学医学部百年講堂, 福岡, 11 月 10 日-12 日, 2009.
55. Yutaka Tabuchi, Makoto Negoro, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Resonator pulse compensation for precise qubit manipulation, CREST 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, 2010.4.8
56. D. Aratsu, Fault-tolerant quantum computation without measurement, CREST 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, 2010.4.8
57. K. Tateishi, M. Negoro, A. Kagawa, K. Takeda, M. Kitagawa, Solid State Nuclear Spin Qubit System Hyperpolarized with Dynamic Nuclear Polarization using Photoexcited Triplet Electrons, CREST 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, 2010.4.8
58. M. Negoro, K. Tateishi, A. Kagawa, K. Takeda, M. Kitagawa, High proton polarization at room temperature in p-terphenyl crystal with dynamic nuclear polarization using photoexcited triplet

- electrons, CREST 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, 2010.4.8
59. Yutaka Tabuchi, Makoto Negoro, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Total Compensation of Pulse Transients Inside a Resonator, 51st Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference, 93, Daytona Beach, USA (2010), 2010.4.20
 60. K. Tateishi, M. Negoro, A. Kagawa, K. Takeda, M. Kitagawa, Solid State Nuclear Spin Qubit System with Easily-Accessible Bath Cooled with Dynamic Nuclear Polarization using Photoexcited Triplet Electrons, 51st Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference, 93, Daytona Beach, USA (2010), 2010.4.20
 61. M. Negoro, K. Tateishi, A. Kagawa, K. Takeda, M. Kitagawa, High Proton Polarization at Room Temperature in p-terphenyl Crystal with Dynamic Nuclear Polarization, 51st Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference, 93, Daytona Beach, USA (2010), 2010.4.20
 62. K. Tateishi, M. Negoro, A. Kagawa, K. Takeda, M. Kitagawa, Solid State Nuclear Spin Qubit System Hyperpolarized with Dynamic Nuclear Polarization using Photoexcited Triplet Electrons, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka, Japan, 2010.06.01
 63. M. Negoro, K. Tateishi, A. Kagawa, K. Takeda, M. Kitagawa, High Proton Polarization at Room Temperature in p-terphenyl Crystal with Dynamic Nuclear Polarization using Photoexcited Triplet Electrons, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka, Japan, 2010.06.01
 64. D. Aratsu, Modified circuit against error propagation in conventional ancilla preparation for logical Toffoli gate of Steane code, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka, Japan, 2010.06.01
 65. Yutaka Tabuchi, Makoto Negoro, Kazuyuki Takeda, Masahiro Kitagawa, Resonator pulse compensation for precise qubit manipulation, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka, Japan, 2010.06.01
 66. D. Aratsu, Modified circuit against error propagation in conventional ancilla preparation for logical Toffoli gate of Steane code, 10th International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computation, The University of Queensland, Brisbane, Australia, P1-22, p. 112, 2010.07.19

【工位 G】

67. 小笠原華菜子・森田 靖・上田顕・福井晃三・小林忠弘・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 一置換コラスレン誘導体の結晶構造:置換基が曲面 π 共役構造や分子間相互作用に及ぼす影響. 日本化学会第 86 春季年会、2006 年 3 月 27 日～30 日、日本大学船橋キャンパス。
68. 久保孝史・森田靖・中筋一弘. 一重項ビラジカル化合物の合成と二光子吸収特性. 特定領域研究「分子スピン」第 5 回公開シンポジウム. 2005 年 12 月 23～24 日、分子科学研究所。
69. Fukui, K.; Morita, Y.; Nishida, S.; Ueda, A.; Kobayashi, T.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. Exchange Interaction and Spin Density Distribution of Corannulene-Based New Neutral Radicals with Curved-Surface π -Conjugation. 2005 環太平洋国際化学会議 (The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 36 entitled "Magnetism: Molecules to Functional Materials", 2005 年 12 月 15～20 日、米国ハワイ州ホノルル。
70. Murata, T.; Morita, Y.; Nishimura, Y.; Nakasuji, K. Ethylenedithio-TTF-Imidazole: Construction of Pluri-Dimensional Network by Hydrogen-Bond and S...S Interaction. 2005 環太平洋国際化学会議 (The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 115 entitled "Science and Engineering of the Future with Multifunctional Conducting Molecular Materials", 2005 年 12 月 15～20 日、米国ハワイ州ホノルル。
71. Miyazaki, E.; Morita, Y.; Nakasuji, K. New Iodinated 1,6-Dithiapyrenes: Multi-Dimensional Networks by Halogen Bonding in Their Charge Transfer Complexes. 2005 環太平洋国際化学

- 会議(The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 115 entitled "Science and Engineering of the Future with Multifunctional Conducting Molecular Materials"、2005年12月15～20日、米国ハワイ州ホノルル。
72. Suzuki, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. Syntheses, Properties, and Crystal Structures of Hexaazaphenalenyl Anion as a New Multi-Valent Ligand. 2005 環太平洋国際化学会議(The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 120 entitled "Chemistry and Applications of Metal-Organic Frameworks"、2005年12月15～20日、米国ハワイ州ホノルル。
 73. Umemoto, Y.; Morita, Y.; Miyazaki, E.; Nakasuji, K. Trapping of Iodide Ion by Tetrameric TTF Derivative with Isopropyluracil Moiety in the Iodine CT Salt. 2005 環太平洋国際化学会議(The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 111 entitled "Designed pi-Electronic Systems: Synthesis, Properties, Theory and Function"、2005年12月15～20日、米国ハワイ州ホノルル。
 74. Kubo, T.; Shimizu, A.; Sakamoto, M.; Uruichi, M.; Yakushi, K.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Hydrocarbon Semiconductor Based on a Singlet Biradical Compound Containing Phenalenyl and p-Quinodimethane Moieties. 2005 環太平洋国際化学会議(The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, PACIFICHEM 2005)、symposium No. 115 entitled "Science and Engineering of the Future with Multifunctional Conducting Molecular Materials"、2005年12月15～20日、米国ハワイ州ホノルル。
 75. Miyazaki, E.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Syntheses and Crystal Structures of 1,6-Dithiapyrene Derivatives Having Iodine Atom and Their Charge Transfer Complexes and SaltsThe seventh International Symposium on Functional π -Electron Systems (F π 7)2006年5月15～20日、大阪
 76. Yakiyama, Y.; Murata, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Electronic Effect of Hydrogen-Bond in Charge-Transfer Complexes: Ethylenedithio-TTF-Imidazole as a New Electron-Donor MoleculeThe XIIth International Congress of Quantum Chemistry (XII-ICQC2006)2006年5月21～26日、京都
 77. Nakagawa, N.; Kishi, R.; Ohta, S.; Takebe, A.; Umezaki, S.; Takahashi, H.; Furukawa, S.; Kubo, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K.; Kamada, K.; Ohta, K.; Nakano, M. Third-order Nonlinear Optical Properties of Condensed-ring Conjugated Systems Involving Phenalenyl RadicalsThe XIIth International Congress of Quantum Chemistry (XII-ICQC2006)2006年5月21～26日、京都
 78. Nakano, M.; Kishi, R.; Ohta, S.; Nakagawa, N.; Takebe, A.; Umezaki, S.; Takahashi, H.; Furukawa, S.; Kubo, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K.; Kamada, K.; Ohta, K.; Champagne, B.; Botek, E.; Yamaguchi, K. Second Hyperpolarizabilities of Open-shell Systems Involving Phenalenyl Radicals Linked with Acetylene and Vinylene BridgesThe XIIth International Congress of Quantum Chemistry (XII-ICQC2006)2006年5月21～26日、京都
 79. Ukai, T.; Nakata, K.; Yamanaka, S.; Takada, T.; Morita, Y.; Yamaguchi, K. CASCI-DFT Studies on the Magnetic Interactions for the Phenalenyl Radical Dimer SystemThe XIIth International Congress of Quantum Chemistry (XII-ICQC2006)2006年5月21～26日、京都
 80. Nobuyuki Mori, Kozo Fukui, Shigeaki Nakazawa, Shin-ichi Takekuma, Hideko Takekuma, Zen-ichi Yoshida, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji akui, Supramolecular-field-assisted Jahn-Teller distortion of C60 monoanion: molecular dynamics approach by the use of the two-layer ONIOM modelsThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
 81. K. Sugisaki, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, The first theoretical assignments of a UV-vis spectrum of quintet ground-state 2-methylphenylene-1,3-dinitreneThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
 82. Y. Morita, S. Suzuki, K. Fukui, S. Nakazawa, H. Kishida, H. Okamoto, A. Naito, A. Sekine, Y. Ohashi, M. Shiro, K. Sasaki, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, K. Nakasuji, Single-crystal thermochromism in a purely organic neutral radical system based on phenalenylThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan

83. K. Hayakawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Organic supramolecular ferrimagnetics based on hydrogen bonding and acid-base pairingThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
84. Y. Kanzaki, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Spin alignment in novel organic heteromolecular systems based on crown-ether complexes of nitronylnitroxide: generalized ferrimagneticsThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
85. K. Maekawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Generalized ferrimagnetics: Crystal structure and magnetic properties of a complex composed of Ni(II) ions and organic ground-state singlet biradicals as the modelThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
86. Nobuyuki Mori, Takafumi Okauchi, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, Takeji Takui, Single-crystal cw-ESR/ENDOR and DFT studies of Cu(II)octaethylporphyrinThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
87. Nobuyuki Mori, Shigemori Kinjo, Naoki Yokokura, Hideto Matsuoka, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, Takeji Takui, Single-crystal cw-ESR/ENDOR, DFT and SAC-CI studies of pseudo Jahn-Teller distorted Co(II)octaethylporpyrinThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
88. Nobuyuki Mori, Chika Kawashima, Takahisa Nishio, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, Takeji Takui, Single-crystal cw-ESR/ENDOR and DFT Studies of pseudo Jahn-Teller distorted high-spin Fe(III)(Cl)octaethylporphyrinThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
89. Teruaki Koto, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Koichi Itoh, Edel Wasserman, Takeji Takui, omprehensive assignments of cw-ESR and pulse-based electron spin transient nutaion spectra of quintet-spin m-phenylenebis(phenylmethylene) (S=2) from random orientationThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
90. A. Ueda, Y. Morita, K. Fukui, S. Nishida, T. Kobayashi, K. Ogasawara, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, K. Nakasuji, Experimental and theoretical studies on spin structures of curved π -conjugated neutral radical systemsThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
91. Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Sinsuke Nishida, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Akira Ueda, Shuichi Suzuki, Ko Furukawa, Toshikazu Nakamura, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Hofer, Takeji Takui, Implementation of molecular-spin quantum computing by pulsed ENDOR techniqueThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
92. Kazuo Toyota, Nobuyuki Mori, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Takeji Takui, b initio calculation of zero field splitting parameters in organic molecules: application of the UMP2 theory to two-electron spin-spin interaction termThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
93. Tomohiro Yoshino, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Shinsuke Nishida, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Takeji Takui ESR/ENDOR study of diphenyl nitroxide and its derivatives in solution: molecular-spin bus systems for quantum computer/quantum information processingThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
94. Robabeh Rahimi, Kazunobu Sato, Shinsuke Nishida, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Akira Ueda, Shuichi Suzuki, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Takeji Takui, A complete set of magnetic tensors of diphenylnitroxide radical as a molecular entity for quantum computer/quantum information science: their experimental determination and quantum chemical calculationsThe XIIth International Congress of Quantum ChemistryMay 21-26, 2006, Kyoto, Japan
95. Takatoshi Sawai, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Takeji Takui

- Metacyclophane-based high-spin molecule: X-ray crystal structure and electronic structure of sterically rigid metacyclophane based nitroxide tetraradical
The XIIth International Congress of Quantum Chemistry May 21-26, 2006, Kyoto,
96. Y. Kanzaki, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui Spin Alignment in Novel Organic Heteromolecular Systems Based on Crown-Ether Complexes of Nitronyl Nitroxide
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 97. Teruaki Koto, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Koichi Itoh, Edel Wasserman, Takeji Takui Complete analysis of powder-pattern ESR spectra of the first quintet organic high-spin molecule, m-phenylenebis (phenylmethylene) (S=2) as studied by hybrid eigenfield method and pulse-ESR based electron spin transient nutation spectroscopy
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 98. Masato Kuratsu, Shuichi Suzuki, Masatoshi Kozaki, and Keiji Okada Radical-substituted triphenylamine radical cations
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 99. K. Maekawa, T. Ise, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui Crystal structure and magnetic properties of a complex composed of Ni(II) ions and organic ground-state singlet biradicals as a model for generalized ferrimagnetics
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 100. Yuki Masuda, Masato Kuratsu, Shuichi Suzuki, Masatoshi Kozaki, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Keiji Okada Synthesis and Properties of Stable Verdazyl-Substituted Dihydrophenazine Radical Cations
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 101. Nobuyuki Mori, Takafumi Okauchi, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, Takeji Takui Quantum Chemical Calculations of the Magnetic Tensors for Cu(II) octaethylporphyrin as Studied by Single-Crystal ESR/ENDOR Spectroscopy
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 102. Nobuyuki Mori, Shigemori Kinjo, Naoki Yokokura, Hideto Matsuoka, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, Takeji Takui Pseudo Jahn-Teller Distortion of Co(II) octaethylporphyrin as Studied by Single-Crystal ESR/ENDOR Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 103. Nobuyuki Mori, Chika Kawashima, Takahisa Nishio, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, Takeji Takui Electronic Structure of High-Spin Ferric Iron Porphyrin as Studied by Single-Crystal ESR/ENDOR Spectroscopy and Density Functional Theory
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 104. Nishida, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Nakasuji, K.; Takui, T. Intramolecular Electron Transfer Promoted by Hydrogen Bond in Single-Component Redox-Active Open-Shell Systems Based on 6-Oxophenalenoxyl
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 105. Shiori Beppu, Koichiro Tanaka, Kimiaki Furuichi, Masatoshi Kozaki, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Keiji Okada Preparation and Magnetic Properties of a [(2-(3-Pyridyl)(Nitronyl Nitroxide)]₂[Mn(hfac)₂]₃ Chain Complex
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 106. Rahimi, R.; Sato, K.; Nishida, S.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Ueda, A.; Suzuki, S.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Takui, T. Magnetic Tensors of Diphenyl Nitroxide Radical as a Molecular Entity for Quantum Computer/Quantum Information Science: Single-Crystal ESR/ENDOR Measurements and DFT Calculations
Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006,

- Osaka, Japan
107. Takatoshi Sawai, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Takeji Takui, X-ray Crystal Analysis and Two-Dimensional Electron Spin Transient Nutation Study of Sterically Rigid Metacyclophane Based Nitroxide Tetradical Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 108. K. Sugisaki, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, T. Takui, The First Theoretical Assignment of a UV-vis Absorption Spectrum of Quintet Ground-State Dinitrene Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 109. Suzuki, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. The First Structural Direct Identification of Pancake-Bonded Dimer of Phenalenyl Radical by Mass and ¹H/¹³C NMR Spectroscopies Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 110. Tomohiro Yoshino, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Shinsuke Nishida, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Kazuhiro Nakasuji, Takeji Takui, An ESR/ENDOR Study of Diphenyl Nitroxide and Its Derivatives for Molecular-Spin Bus Quantum Computers Satellite Symposium of XIIth International Congress of Quantum Chemistry: Material-oriented Quantum Chemistry May 27-29, 2006, Osaka, Japan
 111. Shinsuke Nishida, Yasushi Morita, Kozo Fukui, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuhiro Nakasuji, Takeji Takui Multifunctional Organic Open-Shell Systems: Spin-Center Transfer and Color Change of 6-Oxophenalenoxyl Neutral Radicals with Electron-Donor Moieties ESR フォーラム研究会 2006/06/10
 112. Teruaki Koto, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Koichi Itoh, Edel Wasserman, and Takeji Takui, Complete analyses of powder-pattern cw- and pulse-based fine-structure ESR spectra of the first quintet organic molecule ESR フォーラム研究会 2006/06/10
 113. Takatoshi Sawai, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, and Takeji Takui, Electronic and Molecular Structures of Macrocyclic Molecule Based Nitroxide Tetradical by Pulsed 2D Electron Spin Transient Nutation Spectroscopy ESR フォーラム研究会 2006/06/10
 114. Nobuyuki Mori, Shigemori Kinjo, Naoki Yokokura, Hideto Matsuoka, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, Takeji Takui, Pseudo Jahn-Teller Distortion of Co(II) octaethylporphyrin as Studied by Single-Crystal CW-ESR/ENDOR Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations ESR フォーラム研究会 2006/06/10
 115. Nobuyuki Mori, Takafumi Okauchi, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, Takeji Takui, Magnetic Parameters of ⁶³Cu(II) octaethylporphyrin as Studied by Single-Crystal ESR/ENDOR Spectroscopy and DFT Calculations ESR フォーラム研究会 2006/06/10
 116. K. Sato, R. Rahimi, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, K. Furukawa, T. Nakamura, M. Kitagawa, K. Nakasuji, H. Hara, P. Carl, P. Hofer, and T. Takui, Implementation of Molecular-Spin Quantum Computers by the Use of Pulsed ENDOR-Based Spin Technology ESR フォーラム研究会 2006/06/10
 117. Tomohiro Yoshino, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Shinsuke Nishida, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, Molecular-Spin Bus Model Systems for Quantum Computers as Studied by Solution ESR/ENDOR: Diphenyl Nitroxide and Its Derivatives ESR フォーラム研究会 2006/06/10
 118. 池滝何以, 久保孝史, 金井 要, 王 志宏, 大内幸雄, 森田 靖, 中筋一弘, 関 一彦 非局在型一重項ビラジカル Ph₂-IDPL 薄膜の STM 観察名古屋大学 21 世紀 COE プログラム「物質科学の拠点形成: 分子機能の解明と創造」第 4 回成果発表会 名古屋大学
 119. Nakano, M.; Kishi, R.; Ohta, S.; Nakagawa, N.; Umezaki, S.; Takebe, A.; Takahashi, H.; Furukawa, S.; Kubo, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K.; Kamada, K.; Ohta, K.; Champagne, B.; Botek, E.; Yamaguchi, K. Theoretical Study on the Third-Order Nonlinear Optical Properties of

- Diradical Systems by the Finite-Field Spin-Flip Configuration Interaction Methods ICSM 2006 (The International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals) 2006年7月2日～7日、Trinity College Dublin, Ireland
120. Ukai, T.; Nakata, N.; Yamanaka, S.; Takada, T.; Morita, Y.; Yamaguchi, K. CASI-DFT Studies of Phenalenyl Radical Dimer System The 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM 2006) 2006年8月13～17日、Victoria, Canada
 121. Sawai T., Ise T., Sato K., Shiomi D., Toyota K., Takui T. High-Spin Macrocyclic Molecule based on Metacyclophane Skelton as Studied by CW-and Pulsed ESR Spectroscopy 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 122. Tanaka K, Furuichi K, Kozaki M, Shiomi D, Sato K, Takui T, Okada K Preparation and Magnetic Properties of 4,6-Bis(imino nitroxide)-substituted Resorcinol and Its Cu-Complex 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 123. Yano M., Kitagawa K., Tatsumi M., Sato K., Takui T. Analysis of the Decomposed Products of High-Spin Dication Diradicals 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 124. Nozaki M., Ise T., Shiomi D., Sato K., Takui T. Diaminopyridine-substituted nitronyl nitroxide radical as a building block for molecule-based magnets based on hydrogen-bonded nucleobases 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 125. Koto T, Sato K, Shiomi D, Toyota K, Itoh K, Wasserman E, Takui T, Spin-quintet ESR spectroscopy for random orientation: Complete analyses of powder-pattern cw-and pulse-based ESR spectra of the first quintet organic molecule 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 126. Yoshino T, Sato K, Rahimi R, Nishida S, Toyota K, Shiomi D, Morita Y, Kitagawa M, Takui T, Solution ESR/ENDOR Studies of Diphenyl Nitroxide and Its Derivatives: Molecular-Spin Bus Model Systems for Quantum Computers 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 127. Hayakawa K., Ise T., Shiomi D., Sato K., Takui T. Stable iminonitroxide biradicals: Building blocks for organic heterospin, heteromolecular complexes 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 128. Shiomi D., Ise T., Maekawa K., Nozaki M., Tanaka H., Takenaka H., Sato K., Takui T. Molecular designing of nucleobase-substituted nitronyl nitroxide radicals 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 129. Kanzaki Y., Shiomi D., Ise T., Sato K., Takui T. Benzyl-phenyl ether derivatives of nitronyl nitroxide triradicals as a model for single-component organic molecule-based ferrimagnetics 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 130. Kanzaki Y., Shiomi D., Ise T., Sato K., Takui T. Magnetic interactions in p-phenylene-bis(nitronyl nitroxide) biradicals with large torsion angles 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 131. Okada K, Beppu S, Tanaka K, Furuichi K, Masatoshi K, Shiomi D, Sato K, Takui T, Kitagawa Y, Yamaguchi K Preparation and Magnetic Properties of a Chain Complex of (2-(3-Pyridyl)(Nitronyl Nitroxide) with Mn(hfac) 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 132. Yano M., Fujiwara A., Tatsumi M., Oyama M., Sato K., Takui T. Organic High-Spin Systems; Synthesis, Electrochemical and Spectroscopic Studies of Polyalkylated One-Dimensional Oligoaryl Triamines 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 133. Kanzaki Y., Shiomi D., Ise T., Sawai T., Sato K., Takui T. Exchange interactions in crown ether derivatives of nitronyl nitroxide radicals 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 134. Maekawa K, Ise T, Shiomi D, Sato K, Takui T, Cytosine-and a guanine-substituted nitronyl nitroxide radicals as building blocks for generalized ferrimagnetic system 10th International

- Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
135. Yano M., Fujita M., Miyake M., Tatsumi M., Yajima T., Yamauchi O., Oyama M., Sato K., Takui T. Synthesis and Properties of a Redox Active Ligand with Bispicorylamino Groups and Its Dinuclear Complex 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 136. Sato K., Rahimi R., Nishida S., Toyota K., Shiomi D., Morita Y., Ueda A., Suzuki S., Furukawa K., Nakamura T., Kitagawa M., Nakasuji K., Carl P., Hofer P., Takui T. Molecular-Spin Entanglement between Electron and Nuclear Spins for Quantum Computers as Studied by Pulsed ENDOR Spectroscopy 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 137. Mori N., Okauchi T., Toyota K., Sato K., Shiomi D., Lin W., Dolphin D. H., McDowell the late, Takui T. Quantum Chemical Calculations of Magnetic Tensors of Copperporphyrin; Comparison with Experimental Results by Single-Crystal ESR/ENDOR Spectroscopy 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 138. Mori N., Kawashima C., Nishio T., Toyota K., Sato K., Shiomi D., Lin W., Dolphin D. H., McDowell the late, Takui T. Pseudo Jahn-Teller Distortion of High-Spin Ferric Iron Porphyrin as Studied by Single-Crystal CW- and Pulsed ESR/ENDOR Spectroscopy with Theoretical Considerations 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 139. Mori N., Kinjo S., Yokokura N., Matsuoka H., Toyota K., Sato K., Shiomi D., Lin W., Dolphin D. H., McDowell the late, Takui T. Single-Crystal CW-ESR/ENDOR and DFT Study of Co(II) octaethylporphyrin; Reversible Change between Static Pseudo Jahn-Teller Distortion and Dynamic Pseudo Jahn-Teller Distortion 10th International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM) August 13-17, 2006, Victoria, B.C., Canada
 140. Nobuyuki Mori, Shigemori Kinjo, Naoki Yokokura, Hideto Matsuoka, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, and Takeji Takui, Pseudo Jahn-Teller Distortion of Co(II) octaethylporphyrin as Studied by Single-Crystal CW-ESR/ENDOR Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006 August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
 141. Nobuyuki Mori, Chika Kawashima, Takahisa Nishio, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, and Takeji Takui, Pseudo Jahn-Teller Distortion of High-Spin Fe(III)(Cl) octaethylporphyrin as Studied by Single-Crystal CW-ESR/ENDOR Spectroscopy and DFT Calculations Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006 August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
 142. Tomohiro Yoshino, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Shinsuke Nishida, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, Molecular-Spin Bus Model Systems for Quantum Computers as Studied by Solution ESR/ENDOR: Diphenyl Nitroxide and Its Derivatives Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006 August 24-27, 2006, Novosibirsk, Russia
 143. Teruaki Koto, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Koichi Itoh, Edel Wasserman, and Takeji Takui, CW- and pulse-based ESR study of spin quintet m-PBPM from random orientation Sendai-Berlin-Novosibirsk Joint Seminar on Advanced EPR August 28-31, 2006, Novosibirsk, Russia
 144. Nishida, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Nakasuji, K.; Takui, T. Controllable Magnetic and Optical Properties Induced by Intramolecular Electron Transfer in Phenalenyl-Based Neutral Radicals with Electron-Donor Moieties Sendai-Berlin-Novosibirsk Joint Seminar on Advanced EPR August 28-31, 2006, Novosibirsk, Russia
 145. Takatoshi Sawai, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, and Takeji Takui, CW- and Pulsed ESR Study of Macrocyclic Molecule Based Nitroxide Tetradical Sendai-Berlin-Novosibirsk Joint Seminar on Advanced EPR August 28-31, 2006, Novosibirsk, Russia
 146. Yoshino, T.; Sato, K.; Rahimi, R.; Nishida, S.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. Molecular-Spin Bus Model Systems for Quantum Computers as Studied by Solution ESR/ENDOR: Diphenyl Nitroxide and Its Derivatives Sendai-Berlin-Novosibirsk Joint Seminar on Advanced EPR August 28-31, 2006, Novosibirsk, Russia

147. . Rahimi, R.; Sato, K.; Mori, N.; Nishida, S.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Ueda, A.; Suzuki, S.; Furukawa, K.; Nakamura, T.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Nakahara, M.; Hara, H.; Carl, P.; Hofer, P.; Takui, T. Studies on Entanglement in Electron and Nuclear Spin Systems for Quantum Computing International Conference on Quantum Foundation and Technology (ICQFT) August 25-31, 2006, Hangzhou, China
148. 神崎 祐貴, 伊瀬 智章, 塩見 大輔, 佐藤 和信, 工位 武治 かさ高い置換基を導入した基底 1 重項ビラジカルの分子内交換相互作用分子構造総合討論会 2006/09/20-23
149. 田中 啓之, 伊瀬 智章, 塩見 大輔, 佐藤 和信, 工位 武治 核酸塩基を導入したニトロニルニトロキシドラジカルの合成と磁性分子構造総合討論会 2006/09/20-23
150. 前川 健典, 伊瀬 智章, 塩見 大輔, 佐藤 和信, 工位 武治 グアニン・シトシン置換ニトロニルニトロキシドラジカルの構造と磁性分子構造総合討論会 2006/09/20-23
151. 中田一人・鶴飼健史・山中秀介・高田俊和・久保孝史・森田 靖・山口 兆 多配置参照密度汎関数法による有機ラジカル系の理論的研究分子構造総合討論会 2006 静岡市 2006 年 9 月 20 日～23 日
152. 中川 望・太田 克・岸 亮平・久保孝史・鎌田賢司・太田浩二・Bnoit Champagne・Edith Botek・森田 靖・中筋一弘・高橋英明・古川信一・中野雅由 フェナレニルラジカル含有縮環共役系における中央複素環修飾が3次非線形光学特性に及ぼす効果分子構造総合討論会 2006 年 9 月 20 日～23 日
153. 焼山佑美・村田剛志・森田 靖・中筋一弘 クアテルイミダゾールの二核金属錯体が形成する三重らせん構造第56回錯体化学討論会 2006 年 9 月 16 日～18 日
154. 西田 辰介・森田 靖・森口美紀・福井 晃三・塩見大輔・佐藤 和信・佐藤正春・中筋 一弘・工位 武治 分子結晶性二次電池: 新規 pi 拡張型オキソフェナレノキシル安定中性ラジカルの設計・合成と正極活物質としての性質 第18回基礎有機化学連合討論会、2006 年 10 月 7 日～9 日、福岡市。口頭発表。
155. 西田辰介・森田 靖・福井晃三・佐藤和信・塩見大輔・中筋一弘・工位武治 電子ドナー置換 6-オキソフェナレノキシル中性ラジカルのレドックス挙動の温度・溶媒依存性 第18回基礎有機化学連合討論会 2006 年 10 月 7 日～9 日、福岡市。ポスター発表。
156. 鈴木修一・吉田健太・福井晃三・中舎真美・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・森田 靖・中筋一弘 硫黄官能基を導入したフェナレニル誘導体の合成と構造 第18回基礎有機化学連合討論会、2006 年 10 月 7 日～9 日、福岡市。ポスター発表。
157. 上田 顕・森田 靖・福井晃三・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 フェノキシルラジカル置換コラヌレン誘導体の結晶構造とその物性の解明 第18回基礎有機化学連合討論会、2006 年 10 月 7 日～9 日、福岡市。口頭発表。
158. 小笠原華菜子・上田 顕・福井晃三・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・森田 靖・中筋一弘 曲面 π 共役系にスピンの非局在化した安定中性ラジカル: *tert*-ブチルニトロキシド置換コラヌレン誘導体の合成と電子スピン構造 第18回基礎有機化学連合討論会、2006 年 10 月 7 日～9 日、福岡市。ポスター発表。
159. 焼山佑美・村田剛志・森田 靖・中筋一弘 1,6-ジチアピレン-イミダゾール: 新しい水素結合型電子ドナー分子の合成とその性 第18回基礎有機化学連合討論会、2006 年 10 月 7 日～9 日、福岡市。ポスター発表。
160. 後藤 悠子・久保 孝史・売市 幹大・薬師 久弥・森田 靖・中筋 一弘 ビラジカロイド化合物の一電子酸化状態における電子構造と固体物性 第18回基礎有機化学連合討論会、2006 年 10 月 7 日～9 日、福岡市。ポスター発表。
161. 清水章弘・久保孝史・森田 靖・中筋一弘 アントラキノイド構造を有する非局在型一重項ビラジカルの合成と性質 第18回基礎有機化学連合討論会、2006 年 10 月 7 日～9 日、福岡市。ポスター発表。
162. 伊瀬智章・森展之・吉野共広・西田辰介・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治 電子スピン弱交換相互作用系 QC モデル TEMPO ビラジカルの希釈単結晶の探索と弱交換相互作用系の ESR/ENDOR スペクトル第 45 回電子スピンサイエンス学会年

- 会 2006/11/14-16
163. 増田有希・倉津将人・竹田裕孝・鈴木修一・小寄正敏・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・岡田惠次 フェルダジル置換ジヒドロフェナジンラジカルカチオンの合成と性質第 45 回電子スピンサイエンス学会年会 2006/11/14-16
164. 藤原彬・中西康之・矢野将文・辰巳正和・小山宗孝・佐藤和信・工位武治 基底四重項状態を目指したオリゴアールトリアミン類の設計・合成・物性第 45 回電子スピンサイエンス学会年会 2006/11/14-16
165. 田中啓之・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 ラジカル置換核酸塩基による水素結合錯体の構築と磁性第 45 回電子スピンサイエンス学会年会 2006/11/14-16
166. 倉津将人・鈴木修一・小寄正敏・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・岡田惠次 イミノニトロキシド置換酸素三架橋トリフェニルアミンの合成と性質第 45 回電子スピンサイエンス学会年会 2006/11/14-16
167. 神崎祐貴・塩見大輔・伊瀬智章・沢井隆利・佐藤和信・工位武治 金属イオン認識能をもつクラウンエーテル置換ビラジカルの構造と磁気的性質第 45 回電子スピンサイエンス学会年会 2006/11/14-16
168. 早川健一・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 超分子有機磁性体の構成要素としてのアニリン置換ニトロキシドビラジカルの構造と磁性第 45 回電子スピンサイエンス学会年会 2006/11/14-16
169. 小笠原華菜子・上田顕・福井晃三・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・森田靖・中筋一弘 コラヌレンへのラジカル置換基の導入: 曲面および非交互系におけるスピンの非局在様式第 45 回電子スピンサイエンス学会年会 2006/11/14-16
170. 藤田将之・矢野将文・矢島辰雄・辰巳正和・山内脩・小山宗孝・佐藤和信・工位武治 金属一カチオンラジカルハイブリッド錯体の合成と物性第 45 回電子スピンサイエンス学会年会 2006/11/14-16
171. 豊田 和男, 森 展之, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 工位 武治 有機化合物の零磁場分裂定数—非経験的および密度汎関数法による spin-spin dipolar 項の計算—福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006 年 11 月 29 日
172. 田中啓之・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 ラジカル置換核酸塩基による水素結合ネットワークの構築と分子配列制御福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006 年 11 月 29 日
173. 古藤 輝明, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 豊田 和男, 伊藤 公一, Edel Wasserman , 工位 武治 高スピン 5 重項カルベン m-フェニレンビス(フェニルメチレン)の無秩序配向型 ESR スペクトルの厳密解析解による解析と分子構造のゆらぎについての考察福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006 年 11 月 29 日
174. 西田 辰介・森田 靖・福井 晃三・塩見大輔・佐藤 和信・中筋 一弘・工位 武治 温度依存 CV 測定による TTF 結合型 6-オキソフェナレノキシル中性ラジカルの分子内電子移動の解明福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006 年 11 月 29 日
175. 神崎祐貴・塩見大輔・伊瀬智章・佐藤和信・工位武治 かさ高い置換基を導入した基底 1 重項ビラジカルの分子構造と交換相互作用パラメータの相関福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006 年 11 月 29 日
176. 杉崎研司・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・工位武治 Theoretical Study of the Molecular and Electronic Structures of Photoproducts of 1,3-Diazido-2-methylbenzene: How do They Differ from the Monoazide Analogs?福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006 年 11 月 29 日
177. 沢井隆利・伊瀬智章・佐藤和信・塩見大輔・豊田和男・工位武治 基底 5 重項シクロファンニトロキシドテトララジカルの分子構造とゼロ磁場分裂テンソルの半経験的計算福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006 年 11 月 29 日
178. 伊瀬智章・森展之・吉野共広・西田辰介・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝

- 浩・工位武治 電子-電子スピン系分子 QC を目指した TEMPO ビラジカル系の希釈単結晶の探求と ESR/ENDOR スペクトル福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006年11月29日
179. 鈴木修一・森田靖・福井晃三・中澤重顕・北川宏・岸田英夫・岡本博・内藤晶・関根あき子・大橋祐二・城始勇・佐々木勝成・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 フェナレニルラジカル誘導体の会合挙動と「サーモクロミズム」福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム有機化合物の零磁場分裂定数
180. 早川健一・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治 超分子有機フェリ磁性体の構成要素としてのアニリン置換ニトロニルニトロキシドビラジカル(S=1)の構造と磁性福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム有機化合物の零磁場分裂定数
181. 前川 健典, 伊瀬 智章, 塩見 大輔, 佐藤 和信, 工位 武治 核酸塩基部位を有するニトロニルニトロキシドビラジカル構造・磁性福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006年11月29日
182. 吉野共広・西田辰介・佐藤和信・Robabeh Rahimi・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治 The Characterization of Diphenyl Nitroxide Radicals as Molecular-Spin Bus Model Systems for Quantum Computing 福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年 記念シンポジウム 2006年11月29日
183. 倉津将人, 鈴木修一, 小寄正敏, 塩見大輔, 佐藤和信, 工位武治, 岡田恵次 平面型および非平面型酸素架橋トリフェニルアミンラジカルカチオン塩の合成と磁気的性質『化学プラットホーム@関西』シンポジウム 2006/12/12
184. 池滝何以・清水章弘・久保孝史・金井 要・王 志宏・大内幸雄・森田 靖・中筋一弘・関 一彦 STM と光電子分光を用いた非局在型一重項ビラジカル Ph₂-IDPL 薄膜の構造と電子状態の研究 第26回表面科学講演大会 2006年11月6日-8日、大阪大学。ポスター発表。
185. 久保孝史・森田 靖・中筋一弘 新規プロトン・電子ドナー金属錯体の開発とその水素結合型電荷移動錯体の物性 特定領域研究「新しい環境下における分子性導体の特異な機能の探索」第6回シンポジウム 2007年1月11日-13日、北海道大学。ポスター発表。
186. 森田 靖・西田辰介・森口実紀・福井晃三・塩見大輔・佐藤和信・佐藤正春・工位武治・中筋一弘 積層型無限次元鎖構造を有する安定な開殻有機分子を用いた新しい二次電池の開発 福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年記念シンポジウム 2006年11月29日、京都大学。ポスター発表。
187. 西田辰介・森田 靖・福井晃三・塩見大輔・佐藤和信・中筋一弘・工位武治 福井謙一 温度依存 CV 測定による TTF 結合型 6-オキソフェナレノキシル中性ラジカル分子内電子移動の解明 京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年記念シンポジウム 2006年11月29日、京都大学。ポスター発表。
188. 小笠原華菜子・上田 顕・福井晃三・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・森田 靖・中筋一弘 各種の中性ラジカルを結合させたコラヌレン誘導体における曲面 π 共役系上のスピン密度の分布様式 福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年記念シンポジウム 2006年11月29日、京都大学。ポスター発表。
189. 清水章弘・久保孝史・売市幹大・薬師久弥・中野雅由・鎌田賢司・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・森田 靖・中筋一弘 非局在型一重項ビラジカルの特異な分子間相互作用および二光子吸収特性 福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年記念シンポジウム 2006年11月29日、京都大学。ポスター発表。
190. 鈴木修一・森田 靖・福井晃三・中澤重顕・北川 宏・岸田英夫・岡本 博・内藤 晶・関根あき子・大橋祐二・城 始勇・佐々木勝成・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・中筋一弘 フェナレニルラジカル誘導体の会合挙動とサーモクロミズム 福井謙一京都大学名誉教授ノーベル化学賞受賞25周年記念シンポジウム 2006年11月29日、京都大学。ポスター発表。
191. 小笠原華菜子・上田 顕・福井晃三・西田辰介・佐藤和信・塩見大輔・工位武治・森田 靖・中筋一弘 コラヌレンへのラジカル置換基の導入: 曲面および非交互系におけるスピンの非局在

- 様式 第45回 電子スピンスイエンズ学会年会 (SEST2006) 2006年11月14日～16日、京都工芸繊維大学。ポスター発表。
192. 焼山佑美・村田剛志・西村美江・森田 靖・中筋一弘 TTF-イミダゾールを基盤とした両性イオン型開殻有機分子の構造と性質 第45回 電子スピンスイエンズ学会年会 (SEST2006) 2006年11月14日～16日、京都工芸繊維大学。ポスター発表。
193. 清水章弘・久保孝史・森田 靖・中筋一弘 一重項ビラジカル性を有する安定なケクレ炭化水素化合物の合成とその電子構造の解明 第45回 電子スピンスイエンズ学会年会 (SEST2006) 2006年11月14日～16日、京都工芸繊維大学。ポスター発表。
194. 後藤悠子・久保孝史・売市幹大・薬師久弥・森田 靖・中筋一弘 フェナレニルを基盤としたビラジカロイドの一電子酸化状態:分子集合状態における電子構造と物性 第45回 電子スピンスイエンズ学会年会 (SEST2006) 2006年11月14日～16日、京都工芸繊維大学。ポスター発表。
195. Yoshino, T.; Nishida, S.; Sato, K.; Rahimi, R.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. Solution ESR/ENDOR Studies of Diphenyl Nitroxide and Its Derivatives as Models for Molecular-Spin Bus Quantum Computer. International Workshop of Molecular Function in Kansai 2006年11月13日、大阪市立大学。Flash Presentation&ポスター発表。
196. Ueda, A.; Morita, Y.; Nishida, S.; Fukui, K.; Ise, T.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. Structure and Characterization of Corannulene with two Phenoxyl Radical Moieties. International Workshop of Molecular Function in Kansai 2006年11月13日、大阪市立大学。Flash Presentation&ポスター発表。
197. Goto Y.; Kubo, T.; Uruichi, M.; Yakushi, K.; Morita, Y.; Nakasuji, K. One-electron Oxidation State of a Phenalenyl-based Biradicaloid: Preparation and Solid State Properties. International Workshop of Molecular Function in Kansai 2006年11月13日、大阪市立大学。Flash Presentation&ポスター発表。Impressive Presentation Award of International Workshop of Molecular Function in Kansai
198. Yakiyama, Y.; Murata, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Triple Stranded Helical Structure: Dinucleic Metal Complex Wrapped by Only Imidazole Moiety. International Workshop of Molecular Function in Kansai 2006年11月13日、大阪市立大学。Flash Presentation&ポスター発表。The Best Impressive Presentation Award of International Workshop of Molecular Function in Kansai
199. Shimizu, A.; Kubo, T.; Uruichi, M.; Yakushi, K.; Nakano, M.; Kamada, K.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Phenalenyl-based Singlet Biradical: Crystal Structure and Solid State Properties Induced by Specific Intermolecular Interaction. International Workshop of Molecular Function in Kansai 2006年11月13日、大阪市立大学。Flash Presentation&ポスター発表。Presentation Award of International Workshop of Molecular Function in Kansai
200. K.; Ueda, A.; Fukui, K.; Nishida, S.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Spin Delocalization and Polarization of Bowl-Shaped Stable Neutral Radicals: Synthesis and Characterization of *tert*-Butyl Nitroxide with Corannulene Moiety. Ogasawara, International Workshop of Molecular Function in Kansai 2006年11月13日、大阪市立大学。Flash Presentation&ポスター発表。
201. 西田辰介・森田 靖・森口実紀・福井晃三・塩見大輔・佐藤和信・佐藤正春・中筋一弘・工位武治 二次電池活物質としての開殻有機分子:オキソフェナレノキシル型多段階レドックス分子の電池特性 分子スピン第8回シンポジウム、2007年1月13日～14日、東京大学。ポスター発表。
202. 小笠原華菜子・上田 顕・横山正幸・福井晃三・西田辰介・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・森田 靖・中筋一弘 コラヌレンを基盤とした曲面型安定中性ラジカルの合成と電子スピン構造 分子スピン第8回シンポジウム、2007年1月13日～14日、東京大学。ポスター発表

203. 伊瀬智章・吉野共広・森 展之・西田辰介・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・森田 靖・北川勝浩・工位武治 分子スピン量子コンピュータを目指した弱交換相互作用系TEMPOピラジカルの磁気希釈単結晶 ESR/ENDOR スペクトル 分子スピン第8回シンポジウム、2007年1月13日～14日、東京大学。ポスター発表。
204. 吉野共広・西田辰介・佐藤和信・Rahimi Robabeh・豊田和男・塩見大輔・森田 靖・北川勝浩・工位武治 分子スピンバス量子コンピュータモデル分子としての DPNO 誘導体の溶液系 ESR/ENDOR の研究 分子スピン第8回シンポジウム、2007年1月13日～14日、東京大学。ポスター発表。
205. K. Sato, R. Rahimi, N. Mori, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, K. Furukawa, T. Nakamura, M. Kitagawa, K. Nakasuji, M. Nakahara, H. Hara, P. Carl, P. Hofer, and T. Takui, Implementation of Molecular Spin Quantum Computing by Pulsed ENDOR Technique: Direct Observation of Quantum Entanglement and Spinor, Second International Symposium on Nanometer-Scale Quantum Physics, nanoPHYS'07, January 24, 2007, Tokyo, Japan
206. 藤田 将之・矢野 将文・矢島 辰雄・辰巳 正和・山内 脩・小山 宗孝・佐藤 和信・工位武治 酸化還元活性中心を持った銅二核錯体の分子内磁氣的相互作用日本化学会第 87 春季年会 2007/3/25-28
207. 杉崎 研司・豊田 和男・佐藤 和信・塩見 大輔・工位 武治 基底 5 重項ジナイトレンの光生成に伴う UV/Vis スペクトル変化の理論的研究日本化学会第 87 春季年会 2007/3/25-28
208. 神崎 祐貴・塩見 大輔・伊瀬 智章・佐藤 和信・工位 武治 単成分有機フェリ磁性体のモデル系の構造及び磁氣的性質日本化学会第 87 春季年会 2007/3/25-28
209. 竹田 拓馬・倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡田 惠次 1,3-ビス(ジアルキルアミノ)-ピレン-7-イル-tert-ブチルニトロキシドの合成と性質日本化学会第 87 春季年会 2007/3/25-28
210. 津田 章平・矢野 将文・辰巳 正和・小山 宗孝・佐藤 和信・工位 武治 中央の環に 3,4-ジメチルフェニル基を持つオリゴアリールトリアミンの設計、合成、物性日本化学会第 87 春季年会 2007/3/25-28
211. 増田 有希・倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡田 惠次 フェルダジル置換ジドロフェナジンラジカルカチオン塩の結晶構造と磁氣的性質日本化学会第 87 春季年会 2007/3/25-28
212. 横山 正幸・森田 靖・森口 実紀・福井 晃三・西田 辰介・上田 顕・小笠原 華菜子・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・中筋 一弘 25 π 系開殻有機分子トリオキソトリアンギュレン誘導体の合成と性質日本化学会第 87 春季年会 2007/3/25-28
213. 吉野共広・佐藤和信・Rahimi・西田辰介・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治. 電子-核二重共鳴法による分子スピンバス量子コンピュータのモデル系の探索とその電子構造. 第 11 回 ESR フォーラム. 京阪奈プラザ. 2007/6/9.
214. 沢井隆利・伊藤智章・佐藤和信・塩見大輔・豊田和男・工位武治. CW 及びパルス ESR 法によるメタシクロファンニトロキシドテトララジカルの電子・分子構造の研究. 第 11 回 ESR フォーラム. 京阪奈プラザ. 2007/6/9.
215. 伊瀬智章・吉野共広・森展之・西田辰介・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治. 電子-電子スピン系分子 QC のモデルとなる TEMPO ピラジカル系の希釈単結晶の探求と ESR/ENDOR スペクトル. 第 11 回 ESR フォーラム. 京阪奈プラザ. 2007/6/9
216. S.Nishida, Y.Morita, A.Yamanaka, K.Fukui, D.Shiomi, K.Sato, K.Nakasuji, T.Takui.Low temperature electrochemical studies on electron donor-acceptor diad systems based on 6-oxophenalenoxyl neutral radical. 第 11 回 ESR フォーラム. 京阪奈プラザ. 2007/6/9
217. 森展之・岡内孝文・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・Lin・Dolphin・McDowell・工位武治. 銅(II)オクタエチルポルフィリンの単結晶 CW-ESR/ENDOR 及び量子化学理論計算による磁気テンソル再現. 第 11 回 ESR フォーラム. 京阪奈プラザ. 2007/6/9

218. 古藤輝明・佐藤和信・塩見大輔・豊田和男・伊藤公一・E Wasserman・工位武治 最初の高スピン 5 重項有機分子及びビスニトロレン5重項分子の無秩序配向微細構造 ESR スペクトルの問題点と完全解析. 第 11 回 ESR フォーラム. 京阪奈プラザ. 2007/6/9
219. 中沢重顕・佐藤和信・塩見大輔・矢野将文・木下隆正・伊藤公一・Shohoji・Franco・Lazana・工位武治 1,3-ジベンゾイルベンゼン系多価アニオン高スピン有機分子・クラスターの構造・電子スピン状態の CW/Pulsed ESR 法による研究 第 11 回 ESR フォーラム. 京阪奈プラザ. 2007/6/9
220. Ueda , Y. Morita , S. Nishida , K. Fukui , T. Ise , D. Shiomi , K. Sato , T. Takui, and K. Nakasuji
Intramolecular Spin-Spin Interaction through a Curved and non-Alternant Hydrocarbon: Corannulene with Phenoxy Radical Moieties, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
221. K. Ogasawara, A. Ueda, M. Yokoyama, K. Fukui, S. Nishida, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Y. Morita, K. Nakasuji, Unique Spin-Delocalized Nature in Bowl-Shaped and Non-Alternant π -Conjugated Systems: Syntheses and Characterization of Corannulene Derivatives Linked with a Stable Neutral Radical Moiety, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
222. S. Suzuki, M. Kozaki, K. Okada, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Y. Morita, K. Nakasuji
Synthesis and Electronic Spin Structure of a π -Extended 1,6-Diazaphenalenyl Radical with Helicenic Structure, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
223. M. Yokoyama, Y. Morita, M. Moriguchi, K. Fukui, S. Nishida, A. Ueda, K. Ogasawara, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, K. Nakasuji, Synthesis, Electronic Spin Structure, and Redox Ability of Trioxotriangulene: Stable Neutral Radical with 25π -Conjugated System, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
224. S. Nishida, Y. Morita, A. Yamanaka, K. Fukui, D. Shiomi, K. Sato, K. Nakasuji, T. Takui
Temperature-Dependent Redox Potentials of 6-Oxophenalenoxyl Neutral Radicals Linked with Electron Donor Moiety: Low Temperature CV Studies, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
225. S. Nakazawa, K. Sato, D. Shiomi, M. Yano, T. Kinoshita, M.L.T.M.B. Franco, M.C.R.L.R.Lazana, M.C.B.L.Shohoji, K. Itoh, T. Takui, Organic Polyanionic High-Spin Molecules with Topological Pseudo-Degeneracy and Their High-Spin Clusters: Models for Organic Ferromagnetic Metals, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
226. S. Nakazawa, K. Sato, D. Shiomi, M.L.T.M.B. Franco, M.C.R.L.R. Lazana, M.C.B.L. Shohoji, T. Takui, Molecular High-Spin Clusters from Polyanionic Aromatics with Geometrically High Symmetry: Another Evidence of the Occurrence of High-Spin States in Polyanionic C60
12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
227. T. Koto, K. Sato, D. Shiomi, K. Toyota, K. Itoh, E. Wasserman, T. Takui, Complete Analyses of Organic-Glass Fine-Structure ESR Spectra of the First Quintet Aromatic Oligocarbene and High-Spin Nitrenes, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan,
228. M. Yano, A. Fujiwara, S. Tsuda, M. Tatsumi, M. Oyama, K. Sato, T. Takui, Amine-based Organic High-spin Systems; Molecular Design Rules for Stable Trication Triradicals, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan

229. K. Sato, R. Rahimi, N. Mori, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, K. Furukawa, T. Nakamura, M. Kitagawa, K. Nakasuji, M. Nakahara, H. Hara, P. Carl, P. Hofer, T. Takui, Development of Molecular Spin-Bus Quantum Computers: Application of Organic Spin systems and Manipulation by Pulsed ENDOR Technique, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
230. M. Kuratsu, S. Suzuki, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, K. Okada, Synthesis and Magnetic Properties of Stable Radical-Substituted Trioxyltriphenylamine (TOT) Radical Cations 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
231. T. Sawai, T. Ise, K. Sato, D. Shiomi, K. Toyota, T. Takui, Molecular Structural Distortion of Metacyclophane-based Nitroxide Tetraradical as Studied by Fine-Structure ESR Spectroscopy, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
232. T. Yoshino, S. Nishida, K. Sato, R. Rahimi, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, M. Kitagawa, T. Takui, Molecular-Spin Bus Model Compounds for Quantum Computers: ESR/ENDOR Studies of DPNO and its Derivatives, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
233. T. Ise, T. Yoshino, N. Mori, S. Nishida, K. Sato, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, M. Kitagawa, T. Takui, Search for Model Compounds of Molecular-Spin Quantum Computers: Magnetically Diluted Single Crystals of TEMPO Biradical Derivatives, 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds, July 22-27, 2007, Awaji Island, Hyogo, Japan
234. Nobuyuki Mori, Hirokazu Sakamoto, Takafumi Okauchi, Kazunobu Sato, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Wei-Ching Lin, David H. Dolphin, the late Charles A. McDowell, and Takeji Takui, Magnetic Tensors of Cu(II)octaethylporphyrin as Studied by Single-Crystal CW-ESR/ENDOR Spectroscopy and Quasi-Relativistic DFT calculations, The 11th Osaka City University International Conference, August 3, 2007, Osaka, Japan
235. Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui, Ab initio Calculations of Zero-Field Splitting Tensors of Organic Molecules in their Excited High-Spin States
The 11th Osaka City University International Conference, August 3, 2007, Osaka, Japan
236. Yuki Kanzaki, Daisuke Shiomi, Takatoshi Sawai, Kazunobu Sato, Keiji Okada, and Takeji Takui
Biradical Paradox in Molecular Aggregates of m-Phenylene Substituted Biradicals, The 11th Osaka City University International Conference, August 3, 2007, Osaka, Japan
237. Takatoshi Sawai, Yuki Kanzaki, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, and Takeji Takui, Electronic and Molecular Structures of Biphenyl-based Nitronylnitroxide Biradical as Studied by cw-ESR Spectroscopy, The 11th Osaka City University International Conference, August 3, 2007, Osaka, Japan
238. Shuichi Suzuki, Masatoshi Kozaki, Keiji Okada, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Yasushi Morita, and Kazuhiro Nakasuji, Electronic Spin Structures of 1,6-Diazaphenalenyl Radicals with Planar and Twisted π -Conjugated Systems, The 11th Osaka City University International Conference, August 3, 2007, Osaka, Japan
239. Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, Diphenyl Nitroxide Derivatives as Studied by Solution ESR/ENDOR Spectroscopy: Molecular Spin-Bus Model Compounds for Quantum Computers/Quantum Information Processing, The 11th Osaka City University International Conference, August 3, 2007, Osaka, Japan

240. 舘沼 利憲¹, 宮里 裕二¹, 佐藤 和信², 塩見 大輔², 安塚 周磨³, 森 健彦⁴, 工位 武治², 田所 誠¹ 有機アクセプターTANCを用いた高伝導性銀(I)錯体の構造と性質 第1回分子科学討論会 2007 東北大学 2007/9/17-20
241. 杉崎 研司, 豊田 和男, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 工位 武治 スピン 5 重項アリルジナイトレンの環拡張/開環反応生成物の電子構造と励起状態に関する理論的研究 第1回分子科学討論会 2007 東北大学 2007/9/17-20
242. 田中 啓之, 塩見 大輔, 佐藤 和信, 岡田 恵次, 工位 武治 天然型核酸塩基と相補的塩基対を形成する新奇開殻分子の構造と磁性 第1回分子科学討論会 2007 東北大学 2007/9/17-20
243. 前川 健典, 田中 啓之, 塩見 大輔, 佐藤 和信, 工位 武治 グアニン・シトシン部位を有するニトロニルニトロキシドラジカルおよびそれらの共結晶固体の構造・磁性 第1回分子科学討論会 2007 東北大学 2007/9/17-20
244. 中澤 重顕^{1, 2}, 佐藤 和信^{1, 2}, 森 展之^{1, 2}, 吉野 共広¹, 伊瀬 智章^{1, 2}, 西田 辰介¹, Rahimi Robabeh³, 塩見 大輔^{1, 2}, 豊田 和男^{1, 2}, 森田 靖^{2, 4}, 中辻 慎一⁵, 中筋 一弘⁴, 原 英之⁶, Carl Patrick⁶, Hoefler Peter⁶, 北川 勝浩^{2, 7}, 工位 武治^{1, 2} 分子スピン量子コンピュータモデル系弱交換相互作用ビラジカルの位相制御型コヒーレントデュアルパルスELDORによる研究 第1回分子科学討論会 2007 東北大学 2007/9/17-20
245. K. Maekawa, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, Heterospin Coordination Compounds Composed of Biradicals in a Singlet (S = 0) Ground State and Transition metal Ions as Models for Generalized Ferrimagnetism, 7th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets(ISCOM2007), September 24-27, 2007, Peniscola, Spain
246. Mikito Nozaki, Daisuke Shiomi, Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Ferromagnetic Chains of Nitronyl Nitroxide Radicals as Organized by Hydrogen Bonding of Nucleobase Substituents, 7th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets(ISCOM2007), September 24-27, 2007, Peniscola, Spain
247. 上田 顕・森田 靖・西田辰介・福井晃三・伊瀬智章・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・中筋一弘
曲面型の非交互 π 共役系における三次元的な分子内スピン間相互作用: コラヌレンを基盤とした安定中性ジラジカルの合成と性質 第37回構造有機化学討論会 北海道大学 2007/10/27-29
248. 小笠原華菜子・上田 顕・福井晃三・西田辰介・伊瀬智章・吉野共広・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・森田 靖・中筋一弘 コラヌレンを基盤としたキレート配位部位を有する曲面型安定開殻有機分子の合成と電子スピン構造の解明 第37回構造有機化学討論会 北海道大学 2007/10/27-29
249. 山中あずさ・森田 靖・西田辰介・福井晃三・佐藤和信・工位武治・中筋一弘 多重水素結合部位を有する核酸塩基を導入した 6-オキソフェナレノキシル誘導体の合成と性質 第37回構造有機化学討論会 北海道大学 2007/10/27-29
250. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, M. Luisa T. M. B. Franco, M. Celina R. L. R. Lazana, M. Candida B. L. Shohoji, Takeji Takui, Molecular High-Spin Clusters from Polyanionic Aromatics with Geometrically High Symmetry: Another Evidence of the Occurrence of High-Spin States in Polyanionic C₆₀ as Studied by CW/Pulsed ESR Spectroscopy, A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology (ISESS-SEST2007), November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
251. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Masafumi Yano, Takamasa Kinoshita, M. Luisa T. M. B. Franco, M. Celina R. L. R. Lazana, M. Candida B. L. Shohoji, Koichi Itoh, Takeji Takui, Organic Polyanionic High-Spin Molecules with Topological Pseudo-Degeneracy

- and Their High-Spin Clusters: Models for Organic Ferromagnetic Metals as Studied by CW/Pulsed ESR and DFT Calculations, A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology (ISESS-SEST2007), November 6-9, 2007, Shizuoka, Japan
252. K. Sugasaki, K. Toyota, K. Sato, D. Shiomi, and T. Takui, Spin-Spin Contributions to the Zero-Field Splitting Tensors: Calculations based on the SAC-CI and CIS Spin Densities, The 2nd Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium for Theoretical/Computational Chemistry, December 7-9, 2007, Kyoto, Japan
253. 神崎祐貴・塩見大輔・沢井隆利・佐藤和信・岡田恵次・工位武治 分子会合による Biradical Paradox のメカニズムの解明 第 5 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム. 京都大学福井謙一記念研究センター. 2007/12/13
254. 田中啓之、塩見大輔、佐藤和信、岡田恵次、工位武治 ジアミノトリアジン骨格を有する開殻分子の合成と磁性:有機磁性体への Bio-inspired アプローチの一環として 第 5 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム. 京都大学福井謙一記念研究センター. 2007/12/13
255. 杉崎研司、古藤輝明、豊田和男、佐藤和信、塩見大輔、伊藤公一、Edel Wasserman、工位武治 アジドの光分解で生成する三重項ナイトレンの零磁場分裂定数に脱離窒素分子が及ぼす影響に関する理論的研究 第 5 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム. 京都大学福井謙一記念研究センター. 2007/12/13
256. 箱井 雄太郎・上田 顕・鈴木 修一・小嵯 正敏・岡田 恵次・西田 辰介・吉野 共広・佐藤和信・工位 武治・森田 靖・中筋 一弘 π 共役系を拡張した 1,6-ジアザフェナレニルラジカルの合成と物性の解明 日本化学会第 88 春季年会. 立教大学、東京. 2008/3/26-30
257. 杉崎 研司・豊田 和男・佐藤 和信・塩見 大輔・工位 武治 m-フェニレンジナイトレンの環拡張／開環反応の理論的研究 日本化学会第 87 春季年会. 立教大学、東京. 2008/3/26-30
258. M. Kuratsu, S. Suzuki, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, X. Lan, Y. Miyazaki, A. Inaba, and K. Okada. Molecule-based magnets composed of nitronyl nitroxide-substituted trioxytriphenylamine radical cations, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
259. M. Kuratsu, S. Suzuki, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, X. Lan, Y. Miyazaki, A. Inaba, and K. Okada, Magnetism of di- and tri-oxytriphenylamine radical cation tetrahaloferrate salts, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
260. M. Yano, H. Takemoto, M. Manabe, M. Tasumi, M. Iyama, K. Sato, and T. Takui, Synthesis and properties of a starburst shaped redox active ligand with bispicolylamino groups and its trinuclear complex, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
261. M. Yano, M. Manabe, M. Tasumi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, Synthesis and properties of oxazole substituted triarylamine cation radicals, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
262. M. Yano, Y. Okino, K. Matsuura, Y. Ichihara, M. Tasumi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, Organic high-spin systems; synthesis, electrochemical and spectroscopic studies of pi-extended tetraaryl m-phenylenediamines, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
263. M. Yano, T. Matsuda, M. Tasumi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, Synthesis and properties of novel ligands with a triarylamine and redox active coordinative units and their complexes, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.

264. M. Yano, Y. Inoue, M. Tasumi, M. Oyama, K. Sato, and T. Takui, Synthesis and properties of novel ligands with radical pendants and their rareearth complexes, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
265. M. Yano, S. Tsuda, M. Tatsumi, M. Oyama, K. Sato, Organic high-spin systems; synthesis, electrochemical and spectroscopic studies of oligoaryltriamines with stable tricationic states, and T. Takui, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
266. Y. Masuda, M. Kuratsu, S. Suzuki, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, and K. Okada, Magnetic Properties of Verdazyl-substituted Dihydrophenazine Radical Cations, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
267. K. Maekawa, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, and N. Shirakawa, Magnetic Phase Transition in Nitronyl Nitroxide Triradical Crystals, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
268. D. Shiomi, K. Maekawa, H. Tanaka, S. Suzuki, M. Kozaki, K. Okada, K. Sato, and T. Takui, Spin-labeled Nucleobases as Building Blocks for Molecule-based Magnetic Systems, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
269. Hiroyuki Tanaka, Daisuke Shiomi, Shuichi Suzuki, Masatoshi Kozaki, Keiji Okada, Kazunobu Sato, and Takeji Takui, Syntheses and Magnetic Properties of Organic Molecular Heterospin Systems Based on Diaminotriazine and Uracil Bases, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
270. Y. Kanzaki, D. Shiomi, T. Sawai, K. Sato, K. Okada, and T. Takui, A Solution to Biradical Paradox: Self-Association of Nitroxide Biradicals, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
271. Y. Kanzaki, D. Shiomi, T. Sawai, K. Sato, K. Okada, and T. Takui, Conformational Changes of Crown Ethers as Probed by Nitroxide Radicals, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
272. Tomoaki Ise, Tomohiro Yoshino, Shigeaki Nakazawa, Nobuyuki Mori, Shinsuke Nishida, Kazunobu Sato, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Takeji Takui, A Molecular Model for Ensemble Electron-Spin Quantum Computers: Crystal Structures and Magnetic Properties of Novel TEMPO Biradicals Designed in terms of Nonequivalent g-Tensor Engineering, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
273. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Nobuyuki Mori, Yasushi Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Masahiro Kitagawa, Hideyuki Hara, Patric Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, A Model for Ensemble Molecular-Spin Quantum Computers as Studied by Single-Crystal ESR, ENDOR, and Pulse-Based Coherent Dual ELDOR: Weakly Exchange-Coupled Biradicals as Electron-Spin Qubits, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
274. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, M.Luisa T.M.B. Franco, M.Celina R.L.R. Lazana, M.Candida B.L. Shohoji, Takeji Takui, C60-Based Poly-Anionic High-Spin Molecular Clusters: Direct Spin Identification and Electron Spin Transient Nutation Spectroscopy for High Spin Chemistry, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
275. Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi,

- Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Takeji Takui, A Model Compound for Molecular-Spin Bus Quantum Computers: Diphenyl Nitroxide Derivatives Studied by Single-Crystal ESR/ENDOR Spectroscopy, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
276. Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui, The First Principle Calculations of the Zero-Field Splitting Tensors of Organic Open-Shell Molecules, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
277. Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Tomoaki Ise, Shigeaki Nakazawa, Yasushi Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Masahiro Kitagawa, Mikio Nakahara, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, Molecular Spin-Bus Quantum Computing by Pulsed ENDOR Technique: Application of Ensemble Molecular Spins to Quantum Information Science, The 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2008), September 21-24, 2008, Florence, Italy.
278. Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui, Ab initio Calculations of the Zero-Field Splitting Tensors of Organic Open-Shell Molecules, The Eighth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), September 14-19 2008, Sydney, Australia.
279. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Masafumi Yano, Takamasa Kinoshita, M.Luisa T.M.B. Franco, M.Celina R.L.R. Lazana, M.Candida B.L. Shohoji, Koichi Itoh, Takeji Takui, Oligo-Ketone Based Polyanionic High-Spin Molecular Clusters with Topological Pseudo-Degeneracy: Models for Organic Ferromagnetic Metals as Studied by CW/Pulsed ESR and DFT Calculations, The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
280. Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, M.Luisa T.M.B. Franco, M.Celina R.L.R. Lazana, M.Candida B.L. Shohoji, Takeji Takui, Molecular High-Spin Clusters from Polyanionic C60 Fullerenes: Another Evidence of the Occurrence of High-Spin States in Polyanionic C60 as Studied by CW/Pulsed ESR Spectroscopy, The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
281. Kazuki Ayabe, Kazunobu Sato, Shinsuke Nishida, Shigeaki Nakazawa, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Mikio Nakahara, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, A Single-Crystal Pulsed ESR Study of Diphenyl Nitroxide as Models for Molecular-Spin Quantum Computers, The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
282. Kenji Sugisaki, Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui, Ab initio Calculations of Spin-Orbit Contributions to the Zero-Field Splitting Tensors of Organic Molecules, The 6th Asia Pacific EPR/ESR Symposium (APES2008), July 13-18, 2008, Cairns, Queensland, Australia.
283. Yamanaka, A.; Morita, Y.; Nishida, S.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K., Spin-Center Transfer of 1,6-Dithiapyrene-incorporated 6-Oxophenalenoxyl: Electronic-spin Structure of Neutral and Zwitterionic Radical States Determined by ENDOR/TRIPLE Spectroscopies, IV International Conference "High spin Molecules and Molecular Magnets" 2008年10月14日~19日、Yekaterinburg、ロシア、ポスター発表
284. 西田辰介・伊瀬智章・吉野共広・中澤重顕・森 展之・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治, 分子スピン量子コンピュータのモデル系・新規ビラジカル設計と合成: ビスデュレン架橋による交換相互作用の制御と g-engineering の検討, 第19回基礎有機化学討論会, 2008年10月3日~5日、大阪大学、ポスター発表

285. 伊瀬智章・中澤重顕・吉野共広・森 展之・西田辰介・佐藤和信・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治, 分子スピン量子コンピュータを目指した新規弱交換相互作用系ヘテロスピラジカルの分子設計と合成開発, 第19回基礎有機化学討論会, 2008年10月3日～5日、大阪大学、ポスター発表
286. 上田 顕・森田 靖・西田辰介・森口実紀・福井晃三・塩見大輔・佐藤和信・工位武治・中筋一弘, トリオキソトリアンギュレン中性ラジカルの多段階レドックス能と電子スピン構造, 第19回基礎有機化学討論会, 2008年10月3日～5日、大阪大学、ポスター発表
287. 焼山佑美・松井佑実子・村田剛志・森田 靖・中筋一弘, クアテルイミダゾールを基盤とする三重らせん型錯体における磁氣的性質, 第19回基礎有機化学討論会, 2008年10月3日～5日、大阪大学、ポスター発表
288. 松井佑実子・焼山佑美・村田剛志・森田 靖・中筋一弘, 鎖状に連結した新規なイミダゾール3量体の合成とその金属イオンとの錯形成挙動の解明, 第19回基礎有機化学討論会, 2008年10月3日～5日、大阪大学、ポスター発表
289. 山中あずさ・森田 靖・西田辰介・佐藤和信・工位武治・中筋一弘, スピン中心移動: 1H-ENDOR/TRIPLE 法によるDTPY置換6-オキソフェナレノキシルの電子スピン構造の解明, 第19回基礎有機化学討論会, 2008年10月3日～5日、大阪大学、ポスター発表
290. 山本陽介・森田 靖・上田 顕・西田辰介・佐藤和信・工位武治・中筋一弘, 三つのメキシ基を有するトリオキソトリアンギュレン誘導体の合成研究, 第19回基礎有機化学討論会, 2008年10月3日～5日、大阪大学、ポスター発表
291. Yoshino, T.; Nishida, S.; Nakazawa, S.; Sato, K.; Rahimi, R.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T., A Model Compound for Molecular-Spin Bus Quantum Computers: Diphenyl Nitroxide Derivatives Studied by Single-Crystal ESR/ENDOR Spectroscopy, 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM), 2008年9月21日～24日、Florence、イタリア。ポスター発表
292. Ise, T.; Yoshino, T.; Nakazawa, S.; Mori, N.; Nishida, S.; Sato, K.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. A Molecular Model for Ensemble Electron-Spin Quantum Computers: Crystal Structures and Magnetic Properties of Novel TEMPO Biradicals Designed in terms of Nonequivalent g-Tensor Engineering, 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM), 2008年9月21日～24日、Florence、イタリア。ポスター発表
293. Ueda, A.; Morita, Y.; Ogasawara, K.; Nishida, S.; Fukui, K.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K., Novel *tert*-Butyl Nitroxide Derivative with Corannulene: Curved pi-Conjugated Neutral Radical Having Coordination Ability, 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM), 2008年9月21日～24日、Florence、イタリア。ポスター発表
294. Yakiyama, Y.; Murata, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Quaterimidazoles: New Ligands for Triple-helicates with Multi-dimensional Network Structures, 11th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM), 2008年9月21日～24日、Florence、イタリア。ポスター発表
295. Yakiyama, Y.; Murata, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K., Triple-stranded Helical Metal Complex of Quaterimidazole and Its Highly-symmetrical Network, XXI Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr2008), 2008年8月23日～31日、大阪国際会議場。ポスター発表
296. Ueda, A.; Morita, Y.; Nishida, S.; Moriguchi, M.; Fukui, K.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K. Synthesis, Crystal Structure, and Magnetic Properties of Trioxotriangulene Stable Neutral Radical, XXI Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr2008), 2008年8月23日～31日、大阪国際会議場。ポスター発表
297. Yakiyama, Y.; Murata, T.; Morita, Y.; Nakasuji, K. Oligo(imidazole)s: New Building Blocks

- for Metallo-Supramolecular Helicates, Strasbourg Delegates for Joint Symposium in Osaka, 2008, *Frontiers in Chemistry and Interface with Biology and Physics*, 2008年6月2日～6月3日、阪大 銀杏会館、ポスター発表
298. Ueda, A.; Morita, Y.; Nishida, S.; Fukui, K.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K., Curved π -Conjugated Phenalenyl System: Synthesis and Elucidation of the Electronic Structure, Strasbourg Delegates for Joint Symposium in Osaka, 2008, *Frontiers in Chemistry and Interface with Biology and Physics*, 2008年6月2日～6月3日、阪大 銀杏会館、ポスター発表
299. 田中 啓之・塩見 大輔・鈴木 修一・小寄 正敏・岡田 恵次・佐藤 和信・工位 武治 ウラシルおよびイソチン置換ニトロキンドラジカルの合成と磁氣的性質、(12030): 1PA-060、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャンパス
300. 竹田 拓馬・倉津 将人・鈴木 修一・小寄 正敏・塩見 大輔・佐藤 和信・工位 武治・岡田 恵次 1,3,6,8-テトラキス(アルキルチオ)ピレン電荷移動塩の合成とその電子物性(阪市大院理)、13207): 3PB-003、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャンパス
301. 西田 辰介・森田 靖・佐藤 和信・工位 武治 Redox-Based Spin Diversity の一般性について: ガルビノキシル系ラジカルジアニオンの発生と電子スピン構造、(13226): 3PB-022、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャンパス
302. 真鍋 充・矢野 将文・辰巳 正和・柏木 行康・中許 昌美・小山 宗孝・大久保 敬・福住 俊一・佐藤 和信・工位 武治 オキサゾール環を持つトリアリアルアミン類の合成と物性、(13231): 3PB-027、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャンパス
303. 沖野 頼慈・矢野 将文・市原 裕二・辰巳 正和・小山 宗孝・佐藤 和信・工位 武治 π 拡張型テトラリアル-m-フェニレンジアミンの合成と電気化学的および分光学的性質、(13232): 3PB-028、日本化学会第 89 春季年会、2009 年 3 月 27 日～30 日、日本大学理工学部船橋キャンパス
304. Yakiyama, Y.; Matsui, Y.; Murata, T.; Hashizume, D.; Nakasuji, K.; Morita, Y. Exploration of Multi-stranded Helical Metal Complexes Composed of Oligo (imidazole)s, Fourth East Asia Symposium on Functional Dyes and Advanced Materials (EAS4), 2009年6月2日～5日、大阪インターナショナルハウス
305. Ueda, A.; Suzuki, S.; Kozaki, M.; Okada, K.; Nishida, S.; Ise, T.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K.; Morita, Y. Helicenic Neutral Radical: Synthesis and Elucidation of Spin-delocalized Nature on Nonplanar p-Electronic System, Fourth East Asia Symposium on Functional Dyes and Advanced Materials (EAS4)
306. Morita, Y. Recent Progress in π -Extended Phenalenyl Chemistry: Stability, Electronic-spin Nature, and Physical Properties, International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules (ISRIUM 2009) 2009年7月5日～10日、Prague、チェコ
307. Ueda, A.; Yokoyama, M.; Nishida, S.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K.; Morita, Y. Trioxotriangulenes: Design and Syntheses of Sterically Non-congested Stable Neutral Radicals, 13th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-13), 2009年7月19日～24日、ルクセンブルク
308. Ise, T.; Nakazawa, S.; Yoshino, T.; Mori, N.; Nishida, S.; Sato, K.; Toyota, K.; Daisuke Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. Molecular Designs and Syntheses of Electron Spin-Qubit Molecules: g -Engineering for Molecular Spin Quantum Computers, 13th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-13), 2009年7月19日～24日、ルクセンブルク
309. Yoshino, T.; Nishida, S.; Nakazawa, S.; Sato, K.; Rahimi, R.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. A Single-Crystal ESR/ENDOR Study of Diphenyl

- Nitroxide Derivatives: Search of Molecular-Spin Bus Systems for Three-Spin Qubit Radical and the Double Bipartite and Tripartite QC Experiments, 9th Asian Conference on Quantum Information Science, 2009年8月26日～29日、中国 南京
310. S.; Sato, K.; Rahimi, R.; Yoshino, T.; Nishida, S.; Ise, T.; Mori, N.; Morita, Y.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Nakasuji, K.; Kitagawa, M.; Hara, H.; Carl, P.; Höfer, P.; Takui, T., Weakly Exchange-Coupled Biradicals as Electron Spin-Qubits: Electron Phases Manipulation Technology, Nakazawa, 9th Asian Conference on Quantum Information Science, 2009年8月26日～29日、中国 南京
311. Murata, T.; Morita, Y.; Yakiyama, Y.; Nakasuji, K. Synthesis, Crystal Structure, and Charge-Transfer Complexes of TTF Derivatives Having Two Imidazole Hydrogen-Bonding Units, Eighth International Symposium On Crystalline Organic Metals, Superconductors And Ferromagnets (ISCOM 2009) 2009年9月12日～17日、北海道ヒルトンニセコビレッジ
312. 野崎 幹人・中澤 重顕・杉崎 研司・佐藤 和信・塩見 大輔・豊田 和男・Aaron S. Micallef・Graeme R. Hanson・北川 勝浩・工位 武治, 2次元量子ビットモデル系、金属フタロシアニンを基盤とする正方対称テトラニトロキシドラジカルの交換相互作用, 2009年9月21日, 第3回分子科学討論会, 名古屋大学東山キャンパス
313. 神崎祐貴・塩見大輔・沢井隆利・中澤重顕・佐藤和信・岡田恵次・工位武治, クラウンエーテル置換ニトロキシドラジカルの分子構造と磁気的パラメータの相関, 2009年9月21日, 第3回分子科学討論会, 名古屋大学東山キャンパス
314. 松井佑実子・焼山佑美・村田剛志・中筋一弘・森田 靖, TTF を導入したクアテルイミダゾール誘導体の合成と性質, 第20回基礎有機化学討論会, 2009年9月28日～30日、群馬大学工学部
315. 上田 顕・西田辰介・芥川奈緒・佐藤正春・工位武治・森田 靖, 分子結晶性二次電池: 多段階レドックス能を有する有機分子の正極活物質への応用, 第20回基礎有機化学討論会, 2009年9月28日～30日、群馬大学工学部
316. 村田剛志・上田 顕・仮屋蘭和貴・中筋一弘・森田 靖, 臭素置換トリオキソトリアンギュレン型中性ラジカルの合成・構造・物性, 第20回基礎有機化学討論会, 2009年9月28日～30日、群馬大学工学部
317. 森田 靖, 置換基効果による中性開殻有機分子の分子内自由度設計, 新学術領域研究「分子自由度」領域会議, 2009年10月6日～7日、東京大学
318. Yakiyama, Y.; Morita, Y.; Murata, T.; Ise, T.; Nakazawa, S.; Hashizume, D.; Shiomi, D.; Sato, K.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Takui, T. Materials Challenge for Implementation of Quantum Computers and Quantum Information Processing Systems: What Can Organic Chemists Do?, IKCOC-11 (The 11th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry), 2009年11月9日～13日、リーガロイヤルホテル京都
319. 焼山佑美・森田 靖・村田剛志・伊瀬智章・中澤重顕・橋爪大輔・塩見大輔・佐藤和信・北川勝浩・中筋一弘・工位武治, 拡張性を有する物質スピン量子ビットへの挑戦: オリゴイミダゾールから成る三重らせん型金属錯体の磁気的希釈単結晶の合成とその電子スピン構造, 第20回基礎有機化学討論, 2009年9月28日～30日、群馬大学工学部
320. 仮屋蘭和貴・上田 顕・村田剛志・西田辰介・佐藤和信・工位武治・森田 靖, 電子供与性置換基を有するトリオキソトリアンギュレン中性ラジカルの合成と物性, 第48回電子スピンスイエンス学会年会(SEST2009), 2009年11月10日～12日, 神戸大学百年記念館
321. K.; Ueda, A.; Murata, T.; Nishida, S.; Sato, K.; Takui, T.; Morita, Y. Trioxotriangulene Derivative: Synthesis and Properties of Stable Neutral Radical Possessing Electron-donating Groups, Kariyazono, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日～18日、淡路夢舞台国際会議場

322. Matsui, Y.; Yakiyama, Y.; Murata, T.; Morita, Y. TTF-introduced Quaterimidazole: New Building Block for the Chiral Molecular Assemblies with Electron-donating Ability, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日～18日、淡路夢舞台国際会議場
323. Y.; Morita, Y.; Murata, T.; Ise, T.; Nakazawa, S.; Hashizume, D.; Shiomi, D.; Sato, K.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Takui, T. Metal Complexes-Based Matter Spin-Qubits: New Approach and Materials Challenge for Implementation of Quantum Computers and Quantum Information Processing Systems, Yakiyama, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日～18日、淡路夢舞台国際会議場
324. Ueda, A.; Nishida, S.; Fukui, K.; Suzuki, S.; Kozaki, M.; Okada, K.; Ise, T.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K.; Morita, Syntheses and Properties of Nonplanar p-Conjugated Neutral Open-shell Molecules with Extensive Spin-delocalized Nature, Y. The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日～18日、淡路夢舞台国際会議場
325. Murata, T.; Ueda, A.; Kariyazono, K.; Ise, T.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Morita, Y. Chemical Modification on Trioxotriangulene Neutral Radical: Synthesis, Crystal Structure, and Properties of a Tribromo Derivative, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日～18日、淡路夢舞台国際会議場
326. Sato, K.; Nakazawa, S.; Nishida, S.; Ise, T.; Mori, N.; Rahimi, R.; Yakiyama, Y.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Nakahara, M.; Hara, H.; Carl, P.; Höfer, P.; Takui, T. The First Few Steps to Implementation of Scalable Molecular-Spin Based QC/QIP: Molecular Designs for Electron Spin-Qubits and Pulsed Electron Magnetic Resonance Spin Technology, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日～18日、淡路夢舞台国際会議場
327. Sato, K.; Nakazawa, S.; Rahimi, R.; Ise, T.; Nishida, S.; Yoshino, T.; Yakiyama, Y.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Nakahara, M.; Hara, H.; Carl, P.; Höfer, P.; Takui, T. Molecular-Spin Quantum Computers by Pulsed Electron Magnetic Resonance Technique, The 3rd Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, 2009年11月15日～18日、淡路夢舞台国際会議場
328. 杉崎研司・豊田和男・佐藤和信・塩見大輔・工位武治, 有機高スピン分子の零磁場分裂テンソルの第一原理計算, 第7回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム, 2009年12月14日, 京都大学
329. 豊田和男・杉崎研司・佐藤和信・塩見大輔, 零磁場分裂のスピン-スピン項の理論計算について, 工位武治, 第7回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム, 2009年12月14日, 京都大学
330. 文部一希・佐藤和信・伊瀬智章・杉崎研司・中澤重頭・森田靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・工位武治, CW-パルスESR 分光法による弱交換相互作用ビラジカルの電子構造に関する研究, 第7回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム, 2009年12月14日, 京都大学
331. 野崎 幹人, 中澤 重頭, 杉崎 研司, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 豊田 和男, Aaron S. Micallef, Graeme R. Hanson, 北川 勝浩, 工位 武治, 正方対称テトラニトロキシドラジカルの交換相互作用の決定 - 2次元量子ビットモデル系の構築を目指して -, 第7回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム, 2009年12月14日, 京都大学
332. 中澤重頭・佐藤和信・吉野共広・伊瀬智章・西田辰介・森展之・Robabeh Rahimi・森田靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・中筋一弘・原英5・Patrick Car5・Peter Hofer・工位武

- 治, Weakly Exchange-Coupled Biradicals as Electron Two-Qubit Systems: Determination of the Spin Dipolar and Exchange Interactions by Single-Crystal Pulse-ELDOR Experiments, 第7回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム, 2009年12月14日, 京都大学
333. 神崎祐貴, 塩見大輔, 沢井隆利, 中澤重顕, 佐藤和信, 岡田恵次, 工位武治, パルス電子-電子二重共鳴法によるクラウンエーテル置換ビラジカルの超分子構造の研究, 第7回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム, 2009年12月14日, 京都大学
334. 吉野共広^{1,5}・西田辰介^{1,5}・中澤重顕^{1,5}・佐藤和信・Robabeh RAHIMI・豊田和男・塩見大輔・森田靖・北川勝浩・工位武治, パルスENDOR法を用いた分子スピンバス量子コンピュータモデル系DP15NO-d8のBell状態の生成と評価, 第7回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム, 2009年12月14日, 京都大学
335. 田中 彩香・佐藤 和信・伊瀬 智章・中澤 重顕・森田 靖・豊田 和男・塩見 大輔・北川 勝浩・工位 武治, コヒーレントELDORを用いた電子-核スピン状態の評価と電子-核パルス多重共鳴法への応用, 日本化学会第90春季年会, 2010年3月26日, 近畿大学
336. Shigeaki Nakazawa(Osaka City Univ.), Tomoaki Ise, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Tomohiro Yoshino, Shinsuke Nishida, Nobuyuki Mori, Yasushi Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Masahiro Kitagawa, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, “Weakly exchange-coupled biradicals as molecular electron-spin qubits: Magnetic properties, peculiar spin-relaxation phenomena, and quantum operations”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-20, p.132 (2010). 2010.04.08, poster.
337. Kazunobu Sato (Osaka City Univ.), Ayaka Tanaka, Shigeaki Nakazawa, Robabeh Rahimi, Tomoaki Ise, Shinsuke Nishida, Tomohiro Yoshino, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Mikio Nakahara, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, “Spin manipulation of molecular-spin multi-qubits in ensemble by pulsed electron magnetic resonance technique”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-21, p.133 (2010). 2010.04.08, poster.
338. Y. Yakiyama(Osaka City Univ.), Y. Morita, S. Nakazawa, T. Murata, T. Ise, D. Hashizume, D. Shiomi, K. Toyota, K. Sato, M. Kitagawa, K. Nakasuji, and T. Takui, “Triple-stranded metallo-helicates addressable as Lloyd's electron spin-qubits of 1D periodicity: A chemists' materials challenge”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-22, p.134 (2010). 2010.04.08, poster.
339. Kenji Sugisaki(Osaka City Univ.), Kazuo Toyota, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, and Takeji Takui, “Quantum chemical calculations of spin-orbit contributions to zero-field splitting tensors in organic open shell entities as molecular spin-qubits”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-25, p.137 (2010). 2010.04.08, poster.
340. Tomohiro Yoshino(Osaka City Univ.), Shinsuke Nishida, Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Robabeh Rahimi, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, “Entanglements in a Synthetic Organic Spin Qubits Radical for Electron Spin-Bus Quantum Computers by Pulsed ENDOR Spin Technology”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-26, p.138 (2010). 2010.04.08, poster.
341. Kazuki Ayabe (Osaka City Univ.), Kazunobu Sato, Tomoaki Ise, Shigeaki Nakazawa, Kenji Sugisaki, Yasushi Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, “CW and pulsed ESR/ELDOR study of a weakly exchange-coupled biradical system as models

- for molecular two-electron spin qubits”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-27, p.139 (2010). 2010.0408, poster.
342. Mikito Nozaki (Osaka City Univ.), Shigeaki Nakazawa, Kenji Sugisaki, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Aaron S. Micallef, Graeme R. Hanson, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, “Four electron + four nuclear spin-qubits in a cluster/graph state of a molecular frame: Phthalocyanine-based tetranitroxide multi-radical as a weakly exchange-coupled system with tetragonal symmetry”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-28, p.140 (2010). 2010.0408, poster.
343. Yuki Kanzaki (Osaka City Univ.), Daisuke Shiomi, Takatoshi Sawai, Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Keiji Okada, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, “Supramolecular electron spin assemblages: An approach to 1D-arrayed electron-spin qubits as characterized by pulse ELDOR”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-29, p.141 (2010). 2010.0408, poster.
344. Shinsuke Nishida (Osaka City Univ.), Tomoaki Ise, Tomohiro Yoshino, Shigeaki Nakazawa, Nobuyuki Mori, Kazunobu Sato, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, “A synthetic approach to electron g-engineering for molecular spin qubits: A bisdurene-bridged biradical with weak exchange-coupling”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-31, p.143 (2010). 2010.04.08, poster.
345. Tomoaki Ise (Osaka City Univ.), Shigeaki Nakazawa, Shinsuke Nishida, Kazunobu Sato, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takeji Takui, “Synthetic molecular spin-qubits: A chemistry approach to g-/A-Engineering based spin quantum computers”, 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), 8TH-32, p.144 (2010). 2010.04.08, poster.
346. A. Ueda (Osaka Univ.), K. Ogasawara, S. Nishida, T. Ise, T. Yoshino, S. Nakazawa, K. Sato, T. Takui, K. Nakasuji, and Y. Morita, “Stable Bowl-Shaped pi-Radical Anion System based on Corannulene: Synthesis and Quantitative Evaluation of Dynamic Electronic-spin Structure”, EuChemS Chemistry Congress Organizers for the Reaxys PhD Prize Poster Session, Nürnberg, Germany, August 29 - September 2, 2010. 2010.08.30, poster.
347. Kazunobu Sato (Osaka City Univ.), Tomohiro Yoshino, Shigeaki Nakazawa, Shinsuke Nishida, Robabeh D. Rahimi, Tomoaki Ise, Ayaka Tanaka, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, “Quantum entanglements and manipulation of molecular spin-qubits by pulsed electron magnetic multiple resonance technique”, The 10th Asian Conference on Quantum Information Science(AQIS'10), 61, p.215 (2010), The University of Tokyo, Japan. 2010.08.30, poster.
348. Shigeaki Nakazawa (Osaka City Univ.), Kazunobu Sato, Tomoaki Ise, Shinsuke Nishida, Tomohiro Yoshino, Nobuyuki Mori, Robabeh Rahimi, Yasushi Morita, Kazuo Toyota, Daisuke Shiomi, Kazuhiro Nakasuji, Masahiro Kitagawa, Hideyuki Hara, Patrick Carl, Peter Höfer, and Takeji Takui, “Molecular Electron Spin-Qubits: Implementation of Quantum Operation and Teleportation”, The 10th Asian Conference on Quantum Information Science (AQIS'10), 72, p.237 (2010), The University of Tokyo, Japan. 2010.08.30, poster.
349. Tomohiro Yoshino (Osaka City Univ.), Shinsuke Nishida, Shigeaki Nakazawa, Kazunobu Sato, Robabeh D. Rahimi, Daisuke Shiomi, Kazuo Toyota, Yasushi Morita, Masahiro Kitagawa, and Takui Takeji, “Pulsed ENDOR Technology Applied to an Isotope-Labeling DPNO Radical Qubit Toward Molecular-Spin Bus QC”, The 10th Asian Conference on Quantum Information Science(AQIS'10), 80, p.253 (2010), The University of Tokyo, Japan. 2010.08.30, poster.

350. 上田 顕(大阪大・院・理)・鈴木修一・岡田恵次・伊瀬智章・佐藤和信・工位武治・森田 靖, 光学活性なスピン非局在型安定中性ラジカル:ヘリセン構造を有するフェナレニルラジカルの合成と物性, 第21回基礎有機化学討論会, 名古屋大学, 2010年9月9日~11日. 2010.09.11, ポスター発表。
351. 仮屋 蘭和貴(大阪大・院・理)・上田 顕・村田剛志・佐藤和信・工位武治・森田 靖, n-ブトキシ基を導入したトリオキソトリアンギュレン誘導体の構造と物性, 第21回基礎有機化学討論会, 名古屋大学, 2010年9月9日~11日. 2010.09.10, ポスター発表。
352. 田中彩香(大阪市大・院・理)・佐藤和信・西田辰介・中澤重顕・森田 靖・豊田和男・塩見大輔・北川勝浩・工位武治, パルスELDOR法による電子-核スピン状態の量子制御と分子スピン量子コンピュータへの展開, 第4回分子科学討論会(Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010), 大阪大学豊中キャンパス, 2010年9月14日~17日. 2010.09.15, ポスター発表。

【小澤G】

353. M. Hotta, T. Karasawa and M. Ozawa, Ancilla-Assisted Enhancement of Channel Estimation for Low-Noise Channels, Conference on Quantum Information and Quantum Control II, Toronto, Canada, August 9, 2006.
354. T. Karasawa, Accuracy Limit of Quantum NOT Gate Induced by Conservation Laws, XXXVIII Symposium on Mathematical Physics, "Quantum Entanglement & Geometry", Torun, Poland, June 4, 2006.
355. M. Hotta, T. Karasawa, K. Matsumoto, and M. Ozawa, Low-noise channel estimation, The Eighth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC2006), Tsukuba, Japan, November 29, 2006.
356. T. Karasawa, M. Ozawa, J. Gea-Banacloche, and K. Nemoto, Quantum precision limits for any implementation of single qubit gates under conservation laws, Noise Information & Complexity at Quantum Scale, Erice, Italy, November 6, 2007.
357. Y. Kawano, Quantum circuit construction on phase functions, Asian conference on Quantum Information Science (AQIS2007), Kyoto, September 3, 2007.
358. Y. Kawano, ギャップ定義可能性とBQP, 第16回量子情報技術研究会 (QIT16), 厚木, 2007年5月18日.
359. T. Karasawa, M. Ozawa, and K. Nemoto, Theoretical constraints on implementations of arbitrary single qubit gates under conservation laws, The Ninth International Conference on Quantum Communication, Measurement and Computing (QCMC2008), Calgary, Canada, August 23, 2008.
360. Y. Kawano, Efficient Algorithm of the Extended Clifford Group, Asian conference on Quantum Information Science (AQIS2008), Seoul, Korea, August 28, 2008.
361. 河野泰人、関川浩、行列分解と複素アダマール行列への応用、第21回量子情報技術研究会 (QIT21)、東京、2009年11月5日。
362. T. Karasawa, M. Ozawa, and Kae Nemoto, Precision limits on a class of multi-qubit gates under conservation laws, The 13th workshop on quantum information processing (QIP 2010), Zurich, Switzerland, January 18, 2010.

【中村G】

363. H. Im (Dongguk Univ./RIKEN), Y.A. Pashkin, T. Li, O. Astafiev, Y. Kim, K. Jung, Y. Nakamura, and J. S. Tsai, "Subgap leakage and interface states formation in superconducting junctions", 9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S-IX), Tokyo Japan, September (2009)

364. A. Abdumalikov (RIKEN), O. Astafiev, A.M. Zagoskin, Y.A. Pashkin, Y. Nakamura, and J.S. Tsai, "Quantum Optics with artificial atoms", International Symposium on Physics of Quantum Technology (ISPQT), Tokyo, Japan, April 6-9 (2010)
365. F. Yoshihara (RIKEN), K. Harrabi, A. O. Niskanen, Y. Nakamura, and J.S. Tsai, "Correlated Flux Noise and Decoherence in Two Inductively Coupled Flux Qubits", International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, April 6-9 (2010)
366. P.-M. Billangeon (RIKEN), Y. Nakamura, and J.S. Tsai, "Towards implementation of a high-fidelity controlled-phase gate with flux qubits ", International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, April 6-9 (2010)
367. K. Inomata (RIKEN), M. Watanabe, T. Yamamoto, Y. Nakamura, and J.S. Tsai, "Non-destructive readout of a flux qubit with a superconducting nonlinear resonator", International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, April 6-9 (2010)
368. S. Gustavsson (MIT), J. Bylander, F. Yoshihara, K. Harrabi, Y. Nakamura, J.S. Tsai, W. D. Oliver, " Long coherence time in a superconducting persistent-current qubit", International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, April 6-9 (2010)
369. K. Koshino (Tokyo M&D Univ.), S. Ishizaka, and Y. Nakamura, "Proposal of a deterministic photon-photon entangling gate: passive use of a lambda system", International Symposium on Physics of Quantum Technology, Tokyo, Japan, April 6-9 (2010)
370. 吉原 文樹 (理化学研究所), 中村 泰信, 蔡 兆申, "磁束量子ビットのラビ振動の緩和率測定による磁束ノイズの評価", 最先端研究開発量子情報処理プロジェクト 夏期研修会, 南城, 8月18-28日 (2010)
371. K. Koshino (Tokyo M&D Univ.), S. Ishizaka, and Y. Nakamura, "Deterministic photon-photon (SWAP)^{1/2} gate using a lambda system", 10th Asian Conference on Quantum Information Science (AQIS 10), Tokyo, Japan, August 28-31 (2010)

(4)知財出願

- ①国内出願 (5 件)
- ②海外出願 (1 件)

(5)受賞・報道等

①受賞

主な受賞

1. 小澤 正直 日本数学会賞秋季賞、(社)日本数学会、業績名「量子情報の数学的基礎」、2008年9月25日
2. 工位 武治 2009 IES Silver Medal for Chemistry (IES: International EPR/ESR Society)
3. 蔡 兆申 応用物理学会フェロー (2010年)
4. 小澤 正直 科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞(研究部門)、文部科学省、業績名「量子測定理論の先駆的研究」、2010年4月13日
5. 小澤 正直 International Quantum Communication Award, QCMC Organizing Committee, sponsored by Tamagawa University, "contributions to mathematical theories of quantum measurements and quantum computation", July 22, 2010.

その他(学会での発表に対する受賞)

6. Craig M. Jensen Award 受賞, New Ligands with Extensively π -Conjugated System: Syntheses of Nitrogen-Incorporated Phenalenyl Derivatives and Their Metal Complexes. Suzuki, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. The 7th International 21 Century COE Symposium on Intergrated EcoChemistry (COEIEC VII、第7回国際21世紀COE自然共生化学会議)、2005年12月20日、米国ハワイ州ホノルル
7. 第18回基礎有機化学連合討論会 ポスター賞 清水章弘・久保孝史・森田 靖・中筋一弘, アントラキノイド構造を有する非局在型一重項ビラジカルの合成と性質, 第18回基礎有機化学連合討論会、2006年10月7日~9日、福岡市
8. 第46回NMR討論会若手ポスター賞受賞, 根来 誠 DDSのイメージ周波数とスーパーナイキストサンプリングを用いたデジタル NMR 分光計の駆動周波数向上方法, 第46回NMR 討論会, 札幌コンベンションセンター, 2007年9月11日
9. 第47回NMR討論会若手ポスター賞受賞, 田淵 豊 Active compensation of RF pulse transients 能動制御によるラジオ波パルス過渡現象の補正, 第47回NMR 討論会, 筑波大学, 2008年11月12日
10. Suraj P. Manrao Student Travel Fund, Yutaka Tabuchi, Active Compensation of rf-Pulse Transients, April, 2009.

その他

11. Y. Morita, "Nature Reader Panel" invited by Dr Philip Campbell, Editor-in-Chief of *Nature* by Nature Publishing Group
12. 森田 靖, 大阪大学ベンチャー・サポート・プログラム 優秀賞 (2007年度) 受賞題目: 「分子結晶性二次電池: 多段階酸化還元系有機分子の高効率合成と蓄電材料への応用研究」
13. 2006-2007年大阪大学英文研究年報 (Annual Report) 論文100選, Aromaticity on the Pancake-Bonded Dimer of Neutral Phenalenyl Radical as Studied by MS and NMR Spectroscopies and NICS Analysis, Suzuki, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 2530-2531.
14. 2007-2008年大阪大学英文研究年報 (Annual Report) 論文10選 Thermochromism in an Organic Crystal Based on the Co-existence of s- and p-Dimers, Morita, Y.; Suzuki, S.; Fukui, K.; Nakazawa, S.; Kitagawa, H.; Kishida, H.; Okamoto, H.; Naito, A.; Sekine, A.; Ohashi, Y.; Shiro, M.; Sasaki, K.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K., *Nature Mater.* **2008**, 7, 48-51.

②マスコミ(新聞・TV等)報道(プレス発表をした場合にはその概要もお書き下さい。)

1. 小澤 正直 “日本人が開く量子力学の新しい地平”, 毎日新聞, 2006年1月29日(書評欄).
2. Nature Materials に掲載された原著論文が、2007年11月26日付、日経新聞全国版朝刊19面(科学欄)及び日経WEBのHPに掲載、 Y. Morita, S. Suzuki, K. Fukui, S. Nakazawa, H. Kitagawa, H. Kishida, H. Okamoto, A. Naito, A. Sekine, Y. Ohashi, M. Shiro, K. Sasaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, and K. Nakasuji, "Thermochromism in an Organic Crystal Based on the Co-existence of s- and p-Dimers", *Nature Materials*, **7**, pp.48-51 (2008).
3. 小澤 正直 日本数学会賞授賞報道, 中日新聞, 2008年9月30日.
4. 小澤 正直 “常識に挑む数学(東北大の21世紀)”, 東日本放送, 2008年3月18日(TVインタビュー).

5. “新たな不確定性原理を求めて” 中島林彦 (山崎和夫・小澤正直監修), 日経サイエンス 2007 年 4 月号「特集:不確定性原理の今」; 別冊日経サイエンス 165 「素粒子論の一世紀:湯川, 朝永, 南部そして小林・益川」, 2009 年 5 月発行(取材報道).
6. 小澤 正直 文部科学大臣表彰授賞報道, 朝日新聞, 2010 年 4 月 7 日; 読売新聞, 2010 年 4 月 8 日.
7. 報道解禁日: 2010 年 5 月 10 日、発表方法: 資料配布、プレス発表タイトル: 超伝導人工原子を組み込んだ新量子光学デバイスを開発、一単光子増幅器、人工原子を並べた量子金属材料、光スイッチなどへの応用もー 発表者: 巨視的量子コヒーレンス研究チーム 蔡 兆申, 日本電気株式会社 量子計算チーム、掲載紙・巻・ページ新聞掲載紙面: 5 月 11 日日刊工業新聞朝刊 22, 5 月 11 日化学工業日報朝刊 1, 5 月 14 日日刊工業新聞朝刊 18

③その他

1. “新たな不確定性原理を求めて” 中島林彦 (山崎和夫・小澤正直監修), 日経サイエンス 2007 年 4 月号「特集:不確定性原理の今」; 別冊日経サイエンス 165 「素粒子論の一世紀:湯川, 朝永, 南部そして小林・益川」, 2009 年 5 月発行(取材報道).
2. PhysOrg ウェブサイトにて量子増幅器に関する論文の紹介 “Physicists build quantum amplifier with single artificial atom”, <http://www.physorg.com/news193990952.html>
3. American Physical Society, Physics ウェブサイトにて光子-光子ゲートに関する論文の紹介 “Atomic middle man”
<http://physics.aps.org/synopsis-for/10.1103/PhysRevA.82.010301>

§ 6 研究期間中の主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2007 年 8 月 26 日	東北大学 100 周年記念まつり・東北大名物教授のポケットセミナー (東北大学主催)	東北大学電気通信研究所	100	量子計算と量子暗号に関する一般公開での講演
2010 年 4 月 5 日	「量子コンピュータ/量子テレポーテーションなど量子情報処理技術」に関する高校生・ビギナーのための公開講座	大阪市立大学学術交流センター内文化交流室	50 人	関西・淡路島の高校生を招待して、オックスフォード大学の John Morton 博士を講師に招き、オックスフォードのハリーポッターなどの有名キャラクターを登場させながら、易しく楽しく量子コンピュータ/量子情報処理の真髄を学んだ。
2010 年 7 月 31 日	基盤研究公開セミナー (名古屋大学大学院情報科学研究科主催)	名古屋大学図書館	100	量子計算と量子暗号に関する一般公開での講演

§ 7 結び

【工位 G】

本 CREST の研究課題については、JST 及び領域代表者、研究代表者の guidance を得て、分子スピン 2,3-qubit 系の合成、マイクロ波パルス技術の開拓による CNOT などの基本量子ゲート操作の実行を実現できたことにより、当初の達成目標を達成できた。Synthetic electron-spin qubit の Tailor-made molecular design を完成できたことは、有機合成化学者の多大な貢献である。Lloyd モデル系の物質展開と、metahelicate の qubit manipulation を実験的に一日も早く実現したい。アンサンブル系 qubit を制御する、Q バンドマイクロ波パルス技術の開発では、JST 側の多大なご支援によって、高出力・高分解能、位相制御を達成することができた結果、国際的にも第一線で競争できるまでになった意義は大きい。また、技術開発の結果は、共同開発した企業がパルス Q バンド CD-ELDOR を製品として、売り出している(A Bruker Biospin's Leaflet on Coherent Pulse ELDOR を参照)。

Coherent ELDOR | Bruker BioSpin

1/1 ページ



Bruker BioSpin

Coherent ELDOR

The Next Step in Electron-Electron Double Resonance

Electron-electron double resonance (ELDOR) spectroscopy became very common to measure electron-electron distances (**DEER and PELDOR**) . For more elaborated experiments like Soft ESEEM and TPPI, the two microwave sources need to be phase locked to each other, a setup referred to as Coherent ELDOR.

Coherent ELDOR: The Setup

On the excitation side, the ELDOR source is locked to the main microwave bridge source by a locking unit. The PatternJet pulse programmer provides the necessary external trigger for the lock.

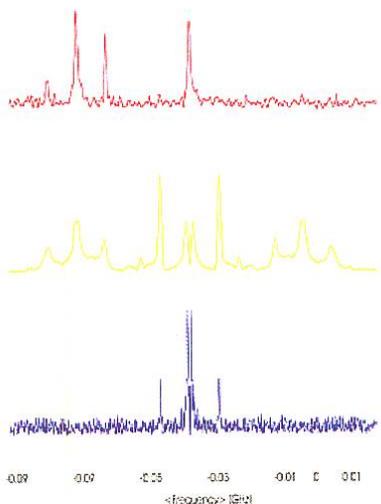
The Coherent ELDOR setup is seamlessly integrated into Bruker's Intermediate Frequency (IF-)concept, readily providing Coherent ELDOR capabilities from 1 to 100 GHz.

Coherent ELDOR: Application Examples

Coherent ELDOR has become commercially available only recently. Key pulsed EPR experiments are Soft ESEEM and TPPI detection. Further, pulsed EPR experiments with two phase-locked sources are also advantageous for Quantum Computing experiments.

Two Frequency Soft-ESEEM

Soft-ESEEM (cf. Schweiger & Jeschke, Principle of pulse electron paramagnetic resonance, ch. 11.3) has the advantage of selectively exciting allowed and forbidden transitions and thus requiring only low mw power levels. The comparison of the two frequency Soft-ESEEM (red, top trace) with the common one-frequency ESEEM (high and low power, green and blue, resp.) clearly demonstrates the increase in resolution and selectivity.



2 frequency Soft-ESEEM (top) vs. high-power and low-power ESEEM (middle and bottom, resp.) demonstrating the increased resolution.



【中村 G】

CREST プロジェクトを通じた JST の支援に大変感謝しています。



中村グループ メンバー

【北川G】



北川グループ 平成 22 年 9 月 研究室旅行 白浜にて



チーム内最終研究報告会 平成 22 年9月 28・29 日 有馬

このような研究を行う貴重な機会を与えていただいた科学技術振興機構JST CRE ST、山本喜久統括をはじめとするアドバイザーの先生方、全てのチームメンバーと共同研究者の皆さん、研究をサポートしていただいたチーム事務員の服部睦代さん、篠原技術参事はじめ事務所の皆さんに、研究代表者として心より感謝します。