

令和 6 年 6 月 21 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01916

研究課題名(和文)非ベンゼン系共役電子系の分子間相互作用と新奇分子設計に基づく未踏物性の探求

研究課題名(英文)Exploration of the Properties of Nonbenzenoid Conjugated Systems based on Intermolecular Interaction and Novel Molecular Design

研究代表者

深澤 愛子 (Fukazawa, Aiko)

京都大学・高等研究院・教授

研究者番号：70432234

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,600,000円

研究成果の概要(和文)：チオフェンを縮環部位にもつペンタレンおよび1,4-ジアザペンタレンの分子間相互作用について解析した結果、積層芳香族性を発現するような面心積層構造の形成は認められなかったものの、交換反発の軽減により密な積層構造の形成が可能であることを見出した。また、一連の新奇反芳香族化合物の合成過程において、ベンゾチオフェン-S,S-ジオキソド縮環ペンタレンが0価ニッケルと安定な錯体を形成することを見出した。

さらに、ペンタフルバレンを部分構造とする拡張電子系の設計により、フラレンC60に比肩する高い電子親和性と多電子還元に対する安定性を平坦な一次元共役系でも獲得できることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

現在の有機光・電子機能性有機材料の基本構造はベンゼンや複素芳香環に依存している。これらの物性や機能の限界を打破する上で、異なる構造特性をもつ化合物群に対する物性の探究や機能開拓の試みは必要不可欠であり、本研究で得られた知見は中でも分子設計や分子間相互作用に対する基礎的な理解を与えるものである。特に、フラレンに迫る電子受容性を一次元炭化水素で実現できたことは、これまでの電子受容体の設計における常識を打破する成果であり、電子受容体の科学に新たな方向性を示すものといえる。

研究成果の概要(英文)：The intermolecular interactions of pentalenes and 1,4-diazapentalenes having thiophene as a fused ring moiety were analyzed and found to be capable of forming densely stacked structures by reducing exchange repulsion, although the formation of face-centered stacking structures that would manifest stacking aromaticity was not observed. During the course of the synthetic studies of a series of novel antiaromatic compounds, we serendipitously found that benzothiophene-S,S-dioxide-fused pentalenes form stable complexes with nickel(0). Furthermore, we have designed the  $\pi$ -conjugated oligomers of pentafulvalene and demonstrated their high electron affinity and robustness against multi-electron reduction close to that of fullerene C60, even in a flat one-dimensional conjugated system.

研究分野：構造有機化学

キーワード：非ベンゼン系共役電子系 共役 反芳香族 ペンタレン ジアザペンタレン 電子受容体 ペンタレン フラレン

## 1. 研究開始当初の背景

電子系は、有機化合物の光・電子機能を追求する上で必要不可欠な構成単位である。真に優れた物性をもつ新たな電子系の創出は、基礎学術と光電子材料への応用の両面から重要であることは論を俟たない。これら有機分子性材料を用いる利点の一つは、その分子構造の自由度の高さであるものの、現在実用化されている光・電子機能性有機材料の基本構造はベンゼンや複素芳香環に依存している。一方で、アヌレンやデヒドロアヌレン、フルバレン、非交互炭化水素などの非ベンゼン系共役電子系の多くは、同程度の分子サイズをもつベンゼン系芳香族化合物では到底実現できないような長波長領域での光吸収や、多段階の酸化還元に対する堅牢性など、魅力的な物性をもつ。すなわち、非ベンゼン系共役電子系は、機能性材料の基本骨格として高い潜在性をもつ未開拓ケミカルスペースであるといえる。本研究課題の核心をなす学術的「問い」は、「非ベンゼン系共役電子系の特徴を真に優れた物性や機能に結びつけるためには、どのような分子設計を施せばよいか」という点に帰着する。そして、この問いに答えを出す上での課題は「芳香環連結反応と比較して非ベンゼン系共役電子系の合成法や変換法は未開拓であり、合成自体に大きな困難を伴うこと」「非ベンゼン系共役電子系の多くは安定性に乏しく、分子間反応を経て容易に分解してしまうこと」、「めざす物性や機能にあわせたプラスアルファの分子設計が必要不可欠であること」の3点に集約される。安定性の問題はかさ高い置換基の導入によって解決できるものの、分子どうしの近接が妨げられるため、電荷輸送や励起子相互作用など強い分子間相互作用が求められる物性には致命的である。これに代わる方法が芳香環の縮環による熱力学的安定化であるが、高い芳香族性をもつベンゼン環を縮環すると、極限共鳴構造ひいては電子構造や物性へ著しい摂動をもたらすというジレンマが存在する。すなわち、上記の「問い」の背後には依然として学術的な課題が山積しており、これらの根本的な解決が必要不可欠である。

さらに、固体状態において  $\pi$  共役化合物から望みの機能を引き出すためには、孤立分子系での性質を前提としながら分子配列が物性に及ぼす影響を理解・制御することが肝要であり、分子配列を左右する分子間相互作用の理解が必要不可欠である。一方で、環状  $\pi$  電子系においては、環を構成する  $\pi$  電子数 (=芳香族性・反芳香族性) が  $\pi$  電子系の積層方向の相互作用に影響を与えることが理論研究により示唆されているものの(Wheeler *et al.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 7847; Schleyer, Warner *et al.* *Org. Lett.* **2007**, *9*, 3263; Fowler *et al.* *Org. Lett.* **2008**, *10*, 5573; J. Aihara, *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 7945)、その実験的検証が可能な分子系自体が僅少であり、分子間相互作用に対する理解が望まれる。

## 2. 研究の目的

本研究では、基礎科学と材料科学の両面にブレイクスルーをもたらす新しい光・電子機能性有機材料を生み出すことを究極のゴールに設定し、非ベンゼン系共役電子系の特徴を凝集系での突出した光・電子機能性へ結びつけることを目的に研究に取り組んだ。申請者がこれまでに取り組んできた「効率的合成法の開発」と「弱い芳香環の縮環による安定化」を基盤とし、非ベンゼン系共役電子系における分子間相互作用の本質理解に努める、めざす物性・機能からバックキャストした独自の分子設計をもとに未踏物性や機能の探求に取り組んだ。

## 3. 研究の方法

### (1) 反芳香族化合物の分子間相互作用の解明と物性探究

反芳香族化合物どうしが積層することで、空間を介した芳香族性(積層芳香族性)が発現することが理論的に予測されたものの、積層構造を形成して安定化することが実際に確認されたのはノルコロールに限られている。積層芳香族性の普遍性やその本質について理解を得るためには、かさ高い置換基をもたずとも安定な反芳香族化合物が必要不可欠である。

このような認識のもと申請者らはこれまでに、反芳香族炭化水素の代表格であるペンタレンに注目し、チオフェン縮環部位の導入により、反芳香族性を維持しつつも熱安定性を担保できることを明らかにしてきた。しかしながら、一連のチオフェン縮環ペンタレンは、側鎖のかさ高さによらず面心積層構造を形成しないことが明らかとなり、その主要因は分子間にはたらく強い交換反発力であることを明らかにしてきた(科研費若手研究(A) 17H04869; *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 1638)。これらの結果を踏まえ、交換反発力の軽減や、分散力の増強を可能とする分子設計により積層構造を観測することは可能か、という問いのもと、縮環構造をもつ種々のペンタレン類の設計・合成に取り組んだ。具体的な研究項目は以下の通りである。

より高い電子受容性をもつペンタレン類縁体の合成と分子間相互作用の解明：ペンタレンど

うしにはたらく交換反発力の軽減を指向して、ペンタレンの C=C 結合の一部を C=N 結合に置き換えた 1,4-ジアザペンタレンを用いることを着想し、チオフェン縮環 1,4-ジアザペンタレン (TAP) およびチアゾール縮環 1,4-ジアザペンタレン (TzAP) の合成研究に取り組んだ。得られた化合物群について、分子配列と分子間力の解析を通して、反芳香族化合物の分子間相互作用に関する知見の獲得に取り組んだ。

拡張型ジチエノペンタレンの合成と分子間相互作用の解明：交換反発力による積層構造の不安定化を分散力の増強により克服することを考え、ベンゾチオフェンおよびベンゾチオフェン-S,S-ジオキドを縮環部位とするペンタレン類の合成に取り組み、分散力の増強が分子配列や分子間相互作用に及ぼす効果について検証した。

複素芳香環が縮環したペンタレンの新規合成法の開発研究：一連の研究を通して、複素芳香環を縮環部位にもつペンタレンの合成の効率の低さがさらなる研究展開のボトルネックであることが浮き彫りになった。そこで本研究では、その新たな合成法の開拓に取り組んだ。

## (2) $\pi$ 拡張型ペンタフルバレンの化学の開拓

非ベンゼン系共役電子系の特徴を、いかに芳香族化合物を基盤とする従来の分子設計では実現しがたい物性に結びつけるかという観点から、電子受容性炭化水素の創製に取り組んだ。炭素-炭素不飽和結合からなる多くの  $\pi$  電子系は本質的に電子供与性が高く、優れた電子輸送能を示す  $\pi$  電子系は正孔輸送材料と比較して限定的である。従来の電子受容性  $\pi$  電子系の大半は、ベンゼン系  $\pi$  共役骨格にフッ素やシアノ基、カルボニル基などの電子求引基を導入するという構造に依存している。一方で、既存の電子受容性  $\pi$  電子系の中で異彩を放つのが  $C_{60}$  に代表されるフラレン類である。 $C_{60}$  は一切の電子求引基をもたないにもかかわらず、低い LUMO と多電子還元への堅牢性をもつ。本研究では、 $C_{60}$  を凌駕するような低い LUMO と多電子還元への堅牢性を異なる構造特性をもつ  $\pi$  電子系で実現することを目指し、研究に取り組んだ。具体的には、 $C_{60}$  の部分構造であり 2 電子還元に対して高い堅牢性をもつペンタフルバレンに注目し、安定性の担保と高い平面性の担保の両面から、ペンタフルバレンの片側のみに芳香環が縮環した構造を基本構造とし、直接連結型  $\pi$  共役オリゴマーおよびポリマーの合成法の確立および物性の解明に取り組んだ。

## 4. 研究成果

### (1) 反芳香族化合物の分子間相互作用の解明と物性探究

チオフェン縮環 1,4-ジアザペンタレンの合成と分子間相互作用の解析

$\pi$  電子系の積層方向に強い分子間相互作用を発現できる新たな反芳香族化合物として、チオフェン縮環部位をもつ 1,4-ジアザペンタレン (TAP) を設計し、その合成に成功した。得られた TAP が固体状態では大気中常温でも安定性であることに加え、C=N 結合による電子受容性の向上を反映して低い LUMO 準位をもつことを確認した。また、TAP は結晶中では面心積層構造ではなく、分子長軸にずれた積層構造をもつものの、その積層面間距離はチオフェン縮環ペンタレンと比較して顕著に短く、分子間の重なりも増大していることが確認され、SAPT を用いた分子間力の解析により、交換反発力が著しく軽減されていることが明らかとなった。また、従来の含窒素環状  $4n\pi$  電子系の多くは対応する環状炭化水素と比較して著しく弱い反芳香族性をもつものに対し、TAP はペンタレンに匹敵する強い反芳香族性をもつことを量子化学計算により明らかにした。チオフェン縮環部位が、反芳香族化合物の安定化だけではなく、その電子の非局在性にも影響を及ぼしていることを示唆する結果である (Chem. Eur. J. 2021, 27, 16127.)。

拡張型ジチエノペンタレンの合成と分子間相互作用の解明

交換反発力による不安定化の克服のために分散力を活用することを考え、チオフェン縮環ペンタレン (DTP) の周辺に  $\pi$  共役系をさらに拡張した誘導体を設計および合成し、これらがジチエノペンタレンよりも近接した積層構造や、より狭い面間距離をもつことを明らかにした。また、量子化学計算により、これらが積層方向に沿って大きな移動積分をもち、有機半導体としての潜在性をもつことを見出した。

複素芳香環が縮環したペンタレンの新規合成法の開発研究

複素芳香環を縮環部位にもつペンタレンの多様性指向型合成法の開拓を念頭に、連続した 5 員環部位をあらかじめ有する脂環式化合物ピシクロ[3.3.0]オクタジオンを出発原料とし、両側に複素芳香環を順次構築する合成戦略を立案した。ピシクロ[3.3.0]オクタ-2,5-ジオン (Weiss ジケトン) を出発原料とし、対角線上に位置するカルボニル 位炭素の立体選択的官能基化について検討する過程で、硫黄官能基であるフェニルスルファニル基 (PhS 基) の導入を検討したところ、当初の予想に反して対角線上に位置するカルボニル 位炭素が PhS 基により完全置換された生成物が得られることを見出した。この生成物を活用し、求電子剤が共存する条件で塩基を作用させることで、残りのカルボニル 位炭素上での脱プロトン化を経由し対応するトリフラートやピバレートに立体特異的に変換することに成功した。また、求電子剤が共存しない条件

で塩基を作用させると、PhS 基が反対側のカルボニル 位炭素上に転位するという予期せぬ反応を見出した。これらの知見は、縮環ペンタレンの合成には結びつきづらいものの、高度に官能基化されたピシクロ[3.3.0]オクタンの合成および化学変換に対して新たな知見を与える成果である (*Eur. J. Org. Chem.* **2022**, 43, e202201029.)。

安定なニッケル-ペンタレン錯体の合成と構造：研究項目(1) において、チオフェン-*S,S*-ジオキシド縮環部位をもつペンタレンの合成に取り組む過程で、この化合物が安定なニッケル(0)錯体を形成することを予期せず見出した。得られたニッケル(0)-ペンタレン錯体は大気下でも単離できるほどの安定性をもつことが明らかとなり、実験および理論の両面から、ニッケルから配位子への強い  $\pi$  逆供与の存在が示唆された。反芳香族炭化水素の配位化学に新たな可能性を拓く成果であると位置付けられる。

## (2) $\pi$ 拡張型ペンタフルバレンの化学の開拓

### ペンタフルバレンオリゴマーの合成と電子受容性の解明

フラレン類は、多くの電子受容性  $\pi$  電子系とは異なり、一切の電子求引基をもたないにもかかわらず優れた電子受容性や多段階の還元に対する突出した堅牢性をもつ。本研究では、フラレンに比肩する電子受容性をもつ新たな非ベンゼン系共役電子系として、ペンタフルバレンを基本骨格とする一次元共役オリゴマーの合成に取り組んだ。1978 年に初めて報告された 3,3'-ジプロモ-1,1'-ビインデニリデンの鍵合成中間体としての有用性に着目し、反応条件の精査によりアリールハロゲン化物や  $B_2pin_2$  との交差カップリング反応が可能な条件を確立した。これをもとにした逐次合成により、ビインデニリデン 3 量体までのオリゴマーの合成に成功した。電気化学測定により、これらの分子が電子求引基をもたないにもかかわらず比較的低い LUMO をもつことに加え、多電子還元に対して高い安定性をもつことを明らかにし、新たなタイプの電子受容性  $\pi$  電子系としての潜在性を示した (*Nat. Commun.* **2023**, 14, 2741)。

### 鎖長ペンタフルバレンオリゴマーの合成と物性解明

上述のペンタフルバレンオリゴマーの合成過程において、ペンタフルバレン骨格上にホウ酸エステル部位を導入した化合物が精製途中や反応条件下で分解することが問題として顕在化した。そこで、官能基をもつベンゼン縮環型ペンタフルバレンの反応性を徹底的に調査し、スタニル基をもつ誘導体の合成法を確立した。これを足がかりに、従来法では合成が困難であったペンタフルバレン4量体の合成に成功した。鎖長の異なるオリゴマーの光物性に基づく外挿によりポリペンタフルバレンの光学バンドギャップを求めることで、ポリアセチレンよりも著しく狭いバンドギャップをもつことを明らかにした。

上述のジベンゾペンタフルバレンは、分子内の C-H 結合間の立体反発によりわずかにねじれた構造をもつ。より平面性の高い骨格を指向した骨格として、分子内立体反発の解消と分子間の交換反発の軽減が可能な新たな分子骨格として、インデノンアジン (IA) を基本骨格とする共役系を新たに設計した。置換基をもたない IA はイミン部位の配置が異なる 3 種類の異性体混合物として得られるのに対し、分子内にメトキシ基やヒドロキシ基を導入することで単一のジアステレオマーを合成することに成功した。結晶構造解析により、一連の IA が平面性の高い構造をもつことに加え、置換基の立体障害の小さなヒドロキシ置換 IA は 3.4 オングストロームを下回る近接した積層構造を形成することを見出した。これらの化合物群は、インデニリデン骨格を有することに加え、電子求引性のアジン部位の導入により高い電子受容性をもつことを明らかにした、五員環交差共役系が電子受容性の担保のために有効であることを示した (*Chem. Eur. J.* **2023**, 29, e202300181)。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 4件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 M. Hayakawa, N. Sunayama, S. I. Takagi, Y. Matsuo, A. Tamaki, S. Yamaguchi, S. Seki, A. Fukazawa	4. 巻 14
2. 論文標題 Flattened 1D fragments of fullerene C60 that exhibit robustness toward multi-electron reduction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 2741
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-023-38300-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Shu I. Takagi, Masahiro Hayakawa, Aiko Fukazawa	4. 巻 29
2. 論文標題 Stereoselective Synthesis and Characterization of Indenone Azine Based Electron Accepting Conjugated Systems	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202300181
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202300181	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 K. Yasui, R. Isogai, A. Fukazawa	4. 巻 43
2. 論文標題 Synthesis and Reactivity of Weiss Diketone Derivative Bearing Four Phenylsulfanyl Groups	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Eur. J. Org. Chem.	6. 最初と最後の頁 e202201029
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejoc.202201029	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Suba Junichi, Fukazawa Aiko	4. 巻 27
2. 論文標題 Thiophene Fused 1,4 Diazapentalene: A Stable C=N Containing Conjugated System with Restored Antiaromaticity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chem. Eur. J.	6. 最初と最後の頁 16127 ~ 16134
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202103122	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計42件(うち招待講演 19件/うち国際学会 19件)

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Exploring the Cross-Conjugated $\pi$ -Electron Systems with Robustness toward Multi-Electron Reduction
3. 学会等名 10th Symposium on Radical Chemistry (PSRC-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Design of Novel Cross-Conjugated $\pi$ -Electron Systems with Robustness toward Multi-Electron Reduction
3. 学会等名 15th International Symposium on Functional- $\pi$ Electron Systems (F 15) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Shu I. Takagi, Masahiro Hayakawa, Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Stereoselective Synthesis and Characterization of Indenone Azine-Based Electron-Accepting $\pi$ -Conjugated Systems
3. 学会等名 RIKEN CEMS Topical Meeting on Chemistry of $\pi$ -Conjugated Materials
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Design of Novel $\pi$ -Electron Systems with Exceptional Stability toward Multi-Electron Reduction
3. 学会等名 RIKEN CEMS Topical Meeting on Chemistry of $\pi$ -Conjugated Materials (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Exploring Novel Nonbenzenoid Hydrocarbons toward Unusual Yet Stable Functional Materials
3. 学会等名 The 1st MacDiarmid Institute-Kyoto University Workshop on Integrated Data-Material Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 長谷川翔大, 今西勇文, 薄葉純一, 安井孝介, 植竹裕太, 深澤愛子
2. 発表標題 反芳香族炭化水素を配位子にもつ0価ニッケル錯体の合成と構造
3. 学会等名 第33回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Riina Kuwata, Takefumi Imanishi, Shota Hasegawa, Yuta Uetake, Junichi Usuba, Kosuke Yasui, Aiko Fukazawa
2. 発表標題 An Air-Stable Ni(0) Complex Coordinated by an Antiaromatic Hydrocarbon
3. 学会等名 The 15th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-15) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takumi Shiokawa, Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Dianionic Species of S-Pechmann Dye: Analogies and Differences between a Cross-Conjugated $\alpha$ -Thiolactone and Pentafulvalene
3. 学会等名 The 15th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-15) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masahiro Hayakawa, Naoyuki Sunayama, Shu I. Takagi, Yu Matsuo, Asuka Tamaki, Shigehiro Yamaguchi, Shu Seki, Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Electron-Accepting Hydrocarbons Composed of Flattened 1D Fragment of Fullerene C60
3. 学会等名 The 15th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-15) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryosuke Isogai, Kosuke Yasui, Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Regioselective Transformation of Weiss Diketone by Introducing Phenylsulfanyl Groups
3. 学会等名 The 15th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-15) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 深澤愛子
2. 発表標題 非ベンゼン系共役電子系のルネサンス：光・電子機能性有機材料の未踏物質空間を拓く
3. 学会等名 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻 第324回分子工学コロキウム (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 深澤愛子
2. 発表標題 光・電子機能性有機材料の未踏物質空間を拓く分子デザインと合成化学
3. 学会等名 Q-PIT photofunction integration workshop & 第43回ケムステVシンポジウム「光化学最前線2024」 (招待講演)
4. 発表年 2024年



1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Molecular Design and Synthetic Chemistry toward the Yet Unexplored Chemical Space of Organic Optoelectronic Materials
3. 学会等名 The MacDiarmid Institute-Kyoto University Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 塩川拓実, 深澤愛子
2. 発表標題 交差共役型 -チオラクトンの還元種の合成と芳香族性の評価
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 鍬田梨衣奈, 今西勇文, 長谷川翔大, 植竹裕太, 薄葉純一, 安井孝介, 深澤愛子
2. 発表標題 反芳香族炭化水素の縮環部位がニッケル(0)への配位能に及ぼす効果
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 高木 周, 王 哲, 早川雅大, 深澤愛子
2. 発表標題 長鎖オリゴペンタフルバレンの逐次合成
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Zhe Wang, Shu. I. Takagi, Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Synthesis and Characterization of Multi-Electron Reduced Species of Oligo(pentafulvalene)s Bearing a 1D Fragment of C60
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Exploring Novel Nonbenzenoid Hydrocarbons toward Unusual Yet Stable Optoelectronic Materials
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Thiophene-fused Pentalene: Highly Antiaromatic Yet Stable $\pi$ -Electron Systems without Bulky Substituents
3. 学会等名 The 19th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-19) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Design of Novel Nonbenzenoid $\pi$ -Electron Systems toward Unusual Yet Stable Functional Materials
3. 学会等名 25th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC 25) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Exploring Novel Nonbenzenoid $\pi$ -Electron Systems toward Unusual Yet Stable Functional Materials
3. 学会等名 UNIST-Kyoto University Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Design of Novel Nonbenzenoid $\pi$ -Electron Systems toward Unusual Yet Stable Functional Materials
3. 学会等名 10th International Conference on Advanced Materials & Nanotechnology (AMN10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Junichi Usuba, Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Thiophene-Fused 1,4-Diazapentalene and Their Derivatives: Nitrogen-Doped 4n $\pi$ Electron System with Strong Antiaromaticity
3. 学会等名 25th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC 25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shu Takagi, Masahiro Hayakawa, Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Stereoselective Synthesis and Properties of Electron-Accepting $\pi$ -Electron Systems Bearing Indenone Azines
3. 学会等名 26th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC 25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 薄葉純一, 深澤愛子
2. 発表標題 強い近赤外吸収をもつ反芳香族化合物の合成
3. 学会等名 第32回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 磯貝涼介, 安井孝介, 深澤愛子
2. 発表標題 Weissジケトンへの硫黄官能基の導入とその位置特異的変換
3. 学会等名 第38回有機合成化学セミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 安井孝介, 深澤愛子
2. 発表標題 含窒素ベンタフルバレンを基本骨格にもつ拡張 共役系の合成, 構造および物性
3. 学会等名 第38回有機合成化学セミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高木 周, 早川雅大, 深澤愛子
2. 発表標題 第38回有機合成化学セミナー
3. 学会等名 基礎有機化学会第2回若手オンラインシンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 今西 勇文, 薄葉 純一, 安井 孝介, 植竹 裕太, 深澤 愛子
2. 発表標題 反芳香族炭化水素が配位したニッケル(0)錯体の合成と構造
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Thiophene-fused Nonbenzenoid Hydrocarbons: Unusual Yet Stable $\pi$ -Electron Materials
3. 学会等名 Symposium on George A. Olah Award in Hydrocarbon or Petroleum Chemistry, ACS Spring Meeting 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 深澤愛子
2. 発表標題 非ベンゼン系共役電子系のルネサンス
3. 学会等名 近畿化学協会 令和3年度第1回合成フォーラム (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 深澤愛子
2. 発表標題 新奇 電子系の設計・合成化学と機能探求
3. 学会等名 東京大学物性研 IPPS ワークショップ ISSP WOMEN 's WEEK 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Exploring Novel Nonbenzenoid -Electron Systems toward Unusual Yet Stable Functional Materials
3. 学会等名 International Workshop on Materials Science, Osaka Prefecture University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Exploring Thiophene-fused Nonbenzenoid Hydrocarbons toward Unusual Yet Stable Functional Materials
3. 学会等名 Yoshida Prize Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Exploring the Novel -Electron Scaffolds and Solubilizing Groups toward Organic Semiconducting Materials
3. 学会等名 The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Aiko Fukazawa
2. 発表標題 Design of Sulfur-Containing -Electron Systems toward Unusual Yet Stable Functional Materials
3. 学会等名 The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 深澤愛子
2. 発表標題 特異な電子構造と安定性をあわせもつ新奇 電子系の創成
3. 学会等名 第955回分子研コロキウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 磯貝涼介, 安井孝介, 深澤愛子
2. 発表標題 硫黄官能基をもつ Weiss ジケトンの合成と位置特異的変換
3. 学会等名 第1回基礎有機化学若手オンラインシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高木 周, 早川雅大, 深澤愛子
2. 発表標題 ケタジン骨格を組み込んだピインデニリデンの合成と物性
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 早川雅大, 砂山尚之, 松尾 優, 深澤愛子
2. 発表標題 ベンゼン縮環ペンタフルバレンの官能基化と拡張 電子系への展開
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 磯貝涼介, 安井孝介, 深澤愛子
2. 発表標題 硫黄官能基をもつ Weiss ジケトンの合成とその位置特異的変換
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 安井孝介, 深澤愛子
2. 発表標題 ジアザペンタフルパレンを基本骨格にもつ拡張 電子系の合成, 構造および物性
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	薄葉 純一 (Usuba Junichi)	京都大学・高等研究院・博士研究員  (14301)	
研究協力者	砂山 尚之 (Sunayama Naoyuki)		
研究協力者	今西 勇文 (Takefumi Imanishi)		



## 6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	磯貝 涼介  (Isogai Ryosuke)		
研究協力者	高木 周  (Takagi Shu)		
研究協力者	後藤 章浩  (Goto Akihiro)		
研究協力者	王 哲  (Wang Zhe)		
研究協力者	鎌田 梨衣菜  (Kuwata Riina)		
研究協力者	安井 孝介  (Yasui Kosuke)  (10877640)	大阪大学・大学院工学研究科・助教   (14401)	
研究協力者	長谷川 翔大  (Hasegawa Shota)  (30981774)	京都大学・高等研究院・特定助教   (14301)	

## 7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------