

令和 2 年 5 月 21 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H01033

研究課題名(和文) 固体内慣性運動を実現する湾曲 面分子の構造科学

研究課題名(英文) Science at curved pi-surfaces for solid-state inertial rotations

研究代表者

磯部 寛之 (ISOBE, Hiroyuki)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・教授

研究者番号：30302805

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 33,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では「固体内慣性運動を実現する湾曲 面分子の構造科学」と題し、固体内分子機械という学際領域での新現象・新機能の発見・開拓を目指して研究を進めた。主題となる研究項目は以下の通りである：1. 固体内慣性運動の実証・精密検証、2. 固体内慣性運動の一般化に向けた理論的解析およびそのフィードバックに基づく新奇ナノ分子機械の設計・合成、3. 固体内慣性運動のもたらす新現象・新機能の探索。以上の主題項目について検討を進め、固体内慣性運動の実証、固体分子機械の構造・動的挙動の多様化に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では固体内分子機械の設計・合成とその運動の解析を行った。ナノスケールで機械的挙動を示す分子機械は近年ナノサイエンス・ナノテクノロジーの分野で注目を集めている。本研究では、分子機械の分野に、「固体内慣性回転」という新しい概念をもたらし、精密測定と理論的解析によりこれを世界で初めて実証した点で学術的に意義深い。また本研究の成果は新しい機能性素材への応用など一般社会への波及効果も期待される。

研究成果の概要(英文)：In this project entitled "Science at curved  $\pi$ -surfaces for solid-state inertial rotations", we aimed at discovering new phenomena and functions in the interdisciplinary field of solid-state molecular machines. The three main topics of the study are "demonstration and precise verification of inertial motion in solids", "theoretical analysis for generalization of solid-state inertial motion towards novel molecular machines" and "exploration for new phenomena/functions caused by solid-state inertial motions". We have successfully demonstrated solid-state inertial motion and have diversified structures and dynamic behaviors of solid-state molecular machines.

研究分野：有機合成化学，物理有機化学，超分子化学

キーワード：分子機械 ナノチューブ フラーレン 分子ベアリング 固体

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

カーボンナノチューブやグラフェンは、ナノ科学・ナノ技術の発端を担い、今なおその期待を高めている代表的なナノ物質である。研究代表者は合成してきた「穴あきグラフェン分子」や「有限長カーボンナノチューブ分子」を用いた構造化学研究を進めてきた。そのなかで筒状分子を用いた「分子ベアリング」を2013年に見いだした。筒状の有限長カーボンナノチューブ分子内にフラーレンが強固に捕捉され、さらに強固な会合力にも関わらず内部のフラーレンが回転するというものであり、内部のフラーレンは固体内においても回転することが分かっていた。固体内での分子運動は、とくに物理・化学分野を主体に、新しい材料の開拓を目指す分子機械の分野で注目されていた。なかでも「amphidynamic crystals/solids」と呼ばれる動的固体においては、固体内分子運動の高速化を目指した研究が展開されており、注目を集めていた。研究開始当初の時点では最高で1 GHz (回転周波数,  $k_{\text{rot}}$ ) に迫る回転運動が実現されていた。

### 2. 研究の目的

本研究では、固体内で100 GHzを超える超高速回転を実現する分子機械の構築を目指した。この超高速化により、拡散運動・ブラウン運動が支配的となることが当然と考えられてきた分子機械の固体内回転運動に、「自由回転」・「慣性運動」という新しい概念・戦略をもたらし、以て新機能・新現象の探索を行おうとしたものである。物理学の分野ではこれまでにC<sub>60</sub>の結晶内やカーボンナノチューブピーポッド内での超高速回転が報告されてきた。特にピーポッド内での回転は分子機械としての可能性を示すものであったが、明確・一義な分子性物質でないこと由来するばらつきの大いデータが散見され、当該分野の研究者から懐疑的な評価がなされていた。本研究では目指したのは、「分子性物質での固体内慣性回転」を実現し、この新現象を精度・信頼性をもって明示することであった。

### 3. 研究の方法

本研究の遂行に当たっては、主に次の事項について検討を進めた。研究項目1. 固体内慣性運動の実証・精密検証、研究項目2. 固体内慣性運動のもたらす新現象・新機能の探索、研究項目3. 固体内慣性運動の一般化に向けた理論的解析およびそのフィードバックに基づく新奇ナノ分子機械の設計・合成。研究項目1においては、「固体内慣性回転」という萌芽的発見を確実にすることから着手し、外部ベアリングの多様化による構造活性相関研究に展開した。この研究項目において、回転周波数や運動様式の制御法についての知見を得た。研究項目2,3では、固体内での超高速回転運動という新しい現象を機能性へと変換するための検討を進めた。

### 4. 研究成果

#### (1) 筒状分子の合成

① 五員環包埋型筒状分子[n]CR (Hitosugi, S.; Sato, S.; Matsuno, T.; Koretsune, T.; Arita, R.; Isobe, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 9106-9110.)

本研究課題では、筒状芳香族炭化水素分子を分子ベアリングの「外枠」として用いた。新たな筒状分子の合成は動的分子固体の構造多様化のため重要な研究課題である。これらの筒状炭化水素分子は、カーボンナノチューブとの構造的類似性からも興味深い。カーボンナノチューブを含むナノカーボンには、通常の六員環に加えて五員環や七員環を存在することが知られているが、一義的構造を持つ分子としては検討されてこなかった。本研究では、五員環を含む筒状分子[n]シクロ-5,12-ルビセニレン ([n]CR,  $n=3, 4$ ) を合成した。異性体の分離・構造決定、結晶構造解析による詳細な検討を行った。また、[n]CRを部分構造とする新しい筒状構造体の形成機構について考察し、Stone-Wales型転移反応と、「ad-dimer」により構築されることを見出した。また、理論計算を行い、その電子状態を予測した (図1a)。

② 直径縮小型筒状分子[3]C<sup>db</sup>C (Kogashi, K.; Matsuno, T.; Sato, S.; Isobe, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 7385-7389.)

本研究では、これまでに合成してきたキラルな筒状分子の構造を基盤とし、その直径の縮小を行なった。本研究では筒状分子の構築のため、ジベンゾクリセンと呼ばれる湾曲したパネルを用いることで環状三量体を形成することに成功した。得られた分子は単結晶構造解析によりその分子構造を明らかにした。以前に我々が報告したキラル筒状分子である[4]シクロ-2,8-クリセニレン ([4]CC) と比較すると、カイラル角が一定であり、その直径が異なる筒状分子の構築が実現されたものである。これらの分子の円偏光二色性スペクトルを比較し、理論計算による考察を加えることで、キラル筒状炭化水素分子に特有の物性を明らかにした。すなわち、光励起の際の

遷移電気双極子モーメントが筒状構造内部を回るように回転し、これによって大きな磁気遷移双極子モーメントが生じるという描像を解明した (図 1b).

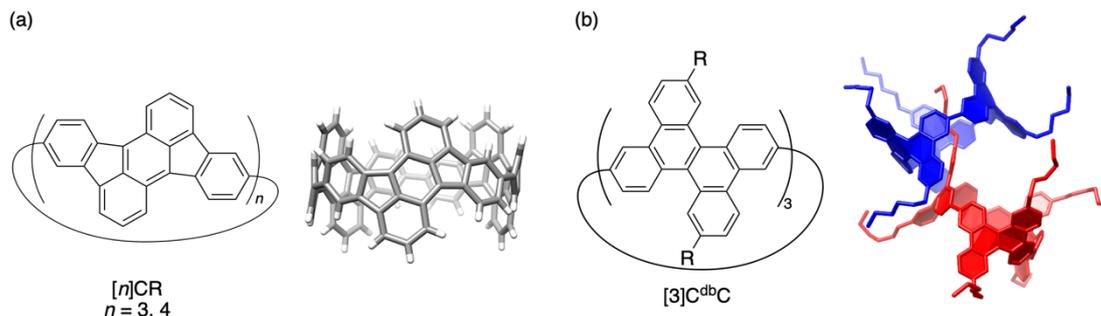


図 1. 構造多様化した筒状分子の構造式と結晶構造. (a) 五員環を含む筒状分子  $[n]CR$ . (b) 直径縮小型筒状分子  $[3]C^{dbC}$ .

## (2) 固体内慣性回転と回転運動制御

### ① フラーレン $C_{60}$ の固体内慣性回転 (Matsuno, T.; Nakai, Y.; Sato, S.; Maniwa, Y.; Isobe, H. *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 1907.)

本研究は、本申請課題の最重要課題となる固体内慣性回転を実現したものである。フラーレン  $C_{60}$  は、その球状分子構造から固体中において高速回転することが知られているが、分子間接触の影響から完全に逃れることができているわけではなく、260 K 以下の低温では「ラチェット相」と呼ばれる結晶相への相転移に伴いその回転が妨げられることが知られている。本研究では、筒状芳香族分子[4]CCに包接された  $C_{60}$  の固体中での分子回転を詳細に検討した。結晶構造の温度依存性と固体  $^{13}C$  NMR 測定によりその回転挙動を詳細に解析した。結晶構造解析からは、温度変化に伴い、激しくディスオーダーした  $C_{60}$  に由来する電子密度が均一に広がる傾向が観測された。固体  $^{13}C$  NMR スペクトルは、マジック角回転 (MAS) を適用しない静的条件においても鋭い左右対称なシグナルを与えたことから、高速で等方性回転していることが明らかとなった。回転周波数は  $^{13}C$  シグナルの縦緩和時間測定を用いて定量した。得られた  $T_1$  から、各温度における回転相関時間  $\tau$  を算出した。回転相関時間は「1 rad 回転するのにかかる時間」であり、この逆数  $1/\tau$  は回転周波数  $k_{rot}$  となる。回転相関時間  $\tau$  の温度依存性より、低温においても回転を妨げるラチェット相が現れないことを明らかとした。また、高温では  $\tau$  は非常に低い値を取り、335 K では 4.7 ps となった (対応する  $k_{rot}$  は 213 GHz という超高速回転となる)。この  $\tau$  の値と、理論的限界値 (自由回転の  $\tau$ )  $\tau_{FR}$  と比較することで、この回転の特異性を明らかにした。Steeleらによると、これらの比  $\tau/\tau_{FR} = \chi$  が 2 よりも低い場合、この回転が「慣性領域」にあると判断される。今回の[4]CCの内部における  $C_{60}$  の  $\chi$  は 335 K で 1.7 となった。すなわち、 $C_{60}$  の妨げのない「固体内慣性回転」を実現したものである。本研究において発見された分子ベアリングの固体内慣性回転は、新物性・新現象の実現に繋がると期待される (図 2a)。

### ② フラーレン $C_{70}$ の固体内単軸回転 (Matsuno, T.; Nakai, Y.; Maniwa, Y.; Someya, M.; Sato, S.; Isobe, H. *Chem. Asian J.* **2020**, *15*, 273-278.)

本研究課題において、固体内における分子運動様式の制御は興味深い研究対象である。本研究は、①の  $C_{60}$  の固体内回転の成果に基づき、ゲスト回転子の形状による回転様式の制御を実現したものである。本研究では、筒状分子[4]CCに楕円体状ゲスト分子  $C_{70}$  を包接させ、その動的挙動を詳細に解析したものである。固体中での回転様式は固体  $^{13}C$  NMR スペクトル測定により明らかにした。マジック角回転 (MAS) を用いない条件において、 $C_{70}$  の  $^{13}C$  NMR スペクトルは、広幅の粉末パターンではなく、比較的鋭く、左右非対称に広がったシグナルを与えた。このスペクトルを  $C_{70}$  がその長軸周りに単軸回転している場合のシミュレーションと比較したところ非常に良い一致を見たことから、この回転が単軸回りのものであることを明らかにした。緩和時間測定により求めた回転周波数の温度依存性より、この回転のエネルギ障壁を詳細に明らかにした。球状で等方性回転する  $C_{60}$  と比較し、エンタルピー障壁はほぼ同等だったのに対し、エントロピー障壁に大きな差があり、これが回転速度にも強く影響することを明らかとした。本研究は、回転子の分子形状の変化により動的挙動が制御可能であることを示すと同時に、回転制御におけるエントロピー項の重要性を示した成果である。(図 2b)。

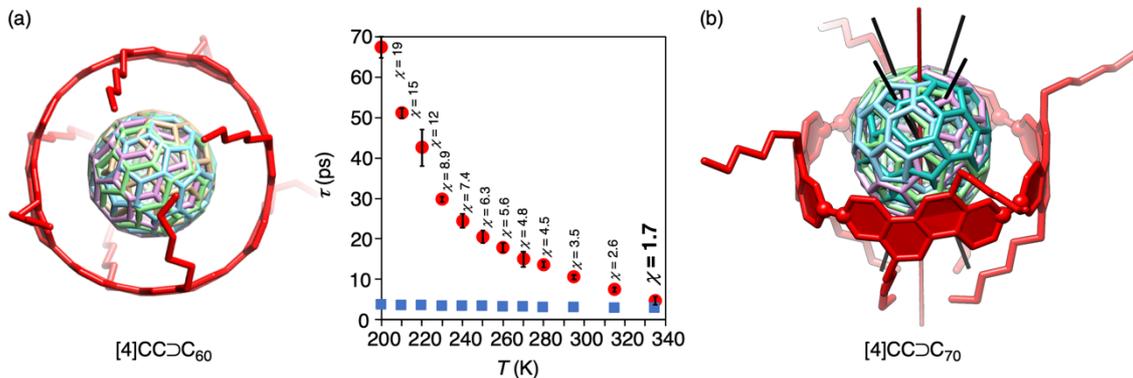


図 2. フラーレンを回転子とする分子ベアリングの固体内回転. (a) 球状分子 C<sub>60</sub> を回転子とする分子ベアリングの結晶構造と回転相関時間の温度依存性. 335 K で慣性回転に至る. (b) 楕円体状分子 C<sub>70</sub> を回転子とする分子ベアリングの結晶構造. 固体内で単軸回転する.

③ 柔軟なホストの内部における C<sub>70</sub> の等方性回転 (Sun, Z.; Mio, T.; Okada, T.; Matsuno, T.; Sato, S.; Kono, H.; Isobe, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 2040-2044.)

本研究は、筒状分子と回転子からなる分子ベアリングシステムにおいて、筒状分子の外枠の柔軟性と分子運動の関係を明らかにしたものである。本研究では、柔軟な筒状分子として [7]シクロ-*amphi*-ナフチレン ([7]CaNAP) を用い、ゲスト回転子として楕円体状の C<sub>70</sub> を用いた。上記の [4]CC と C<sub>70</sub> からなる会合体とは異なり、[7]CaNAP の内部においては C<sub>70</sub> は等方性回転を示すことが溶液 <sup>1</sup>H NMR 解析から明らかとなった。理論計算による詳細な解析の結果、この等方性回転を可能としたのは筒状分子の柔軟性であることが示唆された (図 3)。

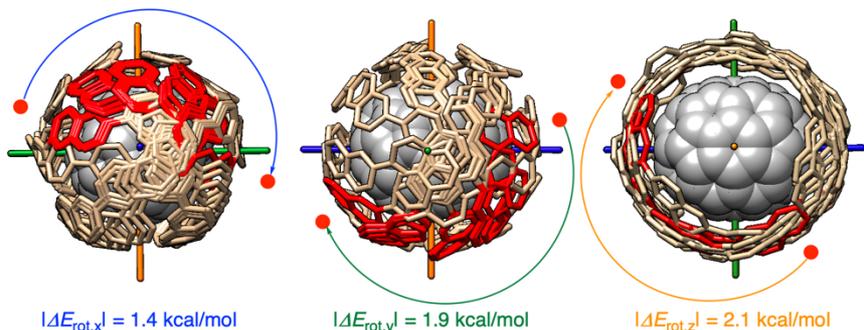


図 3. 柔軟なホスト分子の内部における C<sub>70</sub> の溶液中での等方性回転.

(3) CH- $\pi$  水素結合による超分子形成と動的挙動

① お椀状分子コランニュレンをゲスト回転子とする CH- $\pi$  分子ベアリング (Matsuno, T.; Fujita, M.; Fukunaga, K.; Sato, S.; Isobe, H. *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 3779.)

当初、本研究課題において分子ベアリングの回転子として想定していたのはフラーレン類縁体であったが、予想外にも多環式芳香族分子が利用可能であることが明らかとなった。本研究では、お椀状構造を有する多環式芳香族分子であるコランニュレン (COR) が筒状分子 [4]CC に包接されることを発見した。この会合は、一般に弱い相互作用であることが知られる CH- $\pi$  水素結合のみにより形成されるものであり、超分子化学の観点からも興味深い会合体である。この会合の溶液中の熱力学を等温滴定型カロリメトリー (ITC) を用いて詳細に解明するとともに、結晶構造解析により固体内での分子構造を明らかにした。固体中において、内部に取り込まれたコランニュレンは激しくディスオーダーしており、固体内単軸回転の存在を示唆していた。重水素化したコランニュレンを用い、固体 <sup>2</sup>H NMR 測定によりその動的挙動を解明した。固体 <sup>2</sup>H NMR スペクトルは Pake ダブルレットの形状を示し、そのカップリングから、コランニュレンは予想通り単軸回転していることが明らかとなった。この回転を可能としたのは湾曲した筒状分子内壁とコランニュレンの CH との間に働く CH- $\pi$  水素結合の素早い解離-再結合によるものであり、動的分子固体の新たな設計指針を与える重要な成果である (図 4a)。

② 固体内で静止するピレン (Matsuno, T.; Fukunaga, K.; Sato, S.; Isobe, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 12170-12174.)

本研究では, CH- $\pi$  水素結合により形成する超分子会合体における動的挙動の制御を行なった. 筒状分子[4]CCの内部にゲスト分子としてピレンを包接させた場合, コランニュレンの場合とは異なり, 内部のゲストが固体中において静止することを固体  $^2\text{H}$  NMR により見出したものである. これは, 楕円状のピレンにより[4]CCの構造が歪み, これによりピレンが回転する空間が確保できなくなることによる. このように, CH- $\pi$  水素結合により形成する分子ベアリングにおいても, 分子形状による動的挙動制御が可能であることが示された (図 4b).

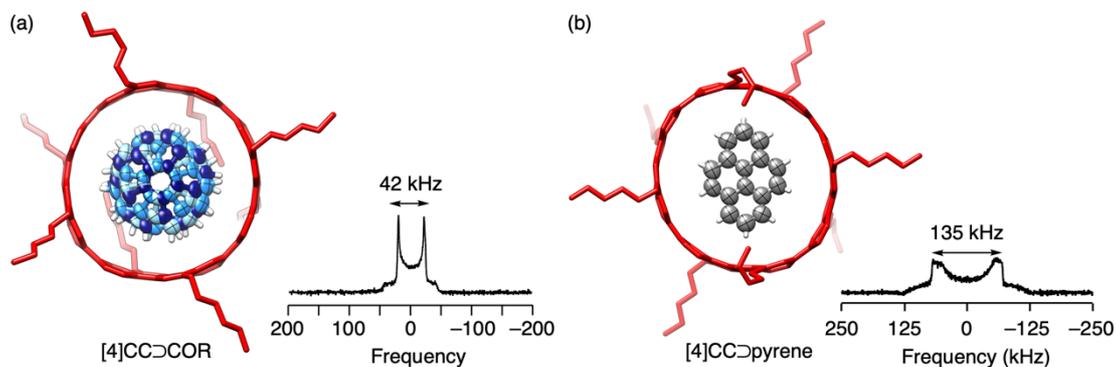


図 4. 多環式芳香族分子を回転子とする分子ベアリングの結晶構造と固体  $^2\text{H}$  NMR スペクトル. (a) お椀状分子コランニュレン (COR) の単軸回転. (b) 固体内で静止するピレン分子.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計25件（うち査読付論文 25件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Kogashi, K.; Matsuno, T.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 58
2. 論文標題 Narrowing segments of helical carbon nanotubes with curved aromatic panels	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 7385-7389
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201902893	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 Yoshii, A.; Ikemoto, K.; Izumi, T.; Taka, H.; Kita, H.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 21
2. 論文標題 Periphery design of macrocyclic materials for organic light-emitting devices with a blue phosphorescent emitter	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 2759-2762
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.9b00717	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 Matsuno, T.; Fukunaga, K.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 58
2. 論文標題 Retarded solid-state rotations of an oval-shaped guest in a deformed cylinder with CH <sub>2</sub> arrays	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 12170-12174
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201907040	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 Fujino, T.; Suzuki, T.; Ooi, T.; Ikemoto, K.; Isobe, H.	4. 巻 14
2. 論文標題 Duplex-forming oligonucleotide of triazole-linked RNA	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chem. Asian J.	6. 最初と最後の頁 3380-3385
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.201901112	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 Ikemoto, K.; Tokuhira, T.; Uetani, A.; Harabuchi, Y.; Sato, S.; Maeda, S.; Isobe, H.	4. 巻 85
2. 論文標題 Fluorescence enhancement of aromatic macrocycles by lowering excited singlet state energies	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Org. Chem.	6. 最初と最後の頁 150-157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.9b02379	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 Matsuno, T.; Nakai, Y.; Maniwa, Y.; Someya, M.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 15
2. 論文標題 Regulated single-axis rotations of a carbonaceous guest in a van der Waals complex with an entropy cost	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chem. Asian J.	6. 最初と最後の頁 273-278
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.201901638	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 Mio, T.; Ikemoto, K.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 59
2. 論文標題 Synthesis of a hemispherical geodesic phenine framework via a polygon assembling strategy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 6567-6571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201915509	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 Mio, T.; Ikemoto, K.; Isobe, H.	4. 巻 15
2. 論文標題 Curved phenine normal vectors: Geometric measures of geodesic phenine frameworks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chem. Asian J.	6. 最初と最後の頁 1355-1359
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.202000271	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 Matsuno, T.; Nakai, Y.; Sato, S.; Maniwa, Y.; Isobe, H.	4. 巻 9
2. 論文標題 Ratchet-free, solid-state inertial rotation of a guest ball in a tight tubular host	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nat. Commun.	6. 最初と最後の頁 1907
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-018-04325-2	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 Ikemoto, K.; Lin, J.; Kobayashi, R.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 57
2. 論文標題 Fluctuating carbonaceous networks with a persistent molecular shape: A saddle-shaped geodesic framework of 1,3,5-trisubstituted benzene (phenine)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 8555-8559
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201803984	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 Matsuno, T.; Fujita, M.; Fukunaga, K.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 9
2. 論文標題 Concyclic CH- arrays for single-axis rotations of a bowl in a tube	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nat. Commun.	6. 最初と最後の頁 3779
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-018-06270-6	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 Sun, Z.; Mio, T.; Okada, T.; Matsuno, T.; Sato, S.; Kono, H.; Isobe, H.	4. 巻 58
2. 論文標題 Unbiased rotational motions of an ellipsoidal guest in a tight yet pliable host	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 2040-2044
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201812771	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 Sun, Z.; Ikemoto, K.; Fukunaga, T. M.; Koretsune, T.; Arita, R.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 363
2. 論文標題 Finite phenine nanotubes with periodic vacancy defects	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Science	6. 最初と最後の頁 151-155
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/science.aau5441	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 Sun Z.; Mio, T.; Ikemoto, K.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 84
2. 論文標題 Synthesis, structures and assembly of geodesic phenine frameworks with isorecticular networks of [n]cyclo-para-phenylenes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Org. Chem.	6. 最初と最後の頁 3500-3507
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.9b00085	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 Suzuki, K. Z.; Izumi, T.; Zhang, X.; Sugihara, A.; Pham, S.-T.; Taka, H.; Sato, S.; Isobe, H.; Mizukami, S.	4. 巻 5
2. 論文標題 Room temperature magnetoresistance in an organic spin valve with an aromatic hydrocarbon macrocycle	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 APL Mater	6. 最初と最後の頁 46101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4979548	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 Ikemoto, K.; Kobayashi, R.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 56
2. 論文標題 Synthesis and Bowl-in-bowl Assembly of a Geodesic Phenylene Bowl	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 6511-6514
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201702063	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 Ikemoto, K.; Kobayashi, R.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 19
2. 論文標題 Entropy-driven ball-in-bowl assembly of fullerene and geodesic phenylene bowl	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 2362-2365
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.7b00899	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 Hitosugi, S.; Sato, S.; Matsuno, T.; Koretsune, T.; Arita, R.; Isobe, H.	4. 巻 56
2. 論文標題 Pentagon-embedded cycloarylene molecules with cylindrical shapes	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 9106-9110
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201704676	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 Tian, Y.; Ikemoto, K.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 12
2. 論文標題 [n]Cyclo-3,6-phenanthrenylenes: Synthesis, structure and fluorescence	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chem. Asian J.	6. 最初と最後の頁 2093-2097
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.201700563	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 Matsuno, T.; Kamata, S.; Sato, S.; Yokoyama, A.; Sarkar, P.; Isobe, H.	4. 巻 56
2. 論文標題 Assembly, thermodynamics and structures of a two-wheeled composite of a dumbbell-shaped molecule and cylindrical molecules with different edges	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 15020-15024
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201709442	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 Matsuno, T.; Kogashi, K.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 巻 19
2. 論文標題 Enhanced yet inverted effects of $\pi$ -extension in self-assembly of curved $\pi$ -systems with helicity	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Org. Lett.	6. 最初と最後の頁 6456-6459
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.7b03534	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 Sota, S.; Yoshii, A.; Takahashi, S.; Furumi, S.; Takeuchi, M.; Isobe, H.	4. 巻 114
2. 論文標題 Chiral intertwined spirals and magnetic transition dipole moments dictated by cylinder helicity	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.	6. 最初と最後の頁 13097-13101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.1717524114	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 Miyamoto, N.; Nakazawa, Y.; Nakamura, T.; Okano, K.; Sato, S.; Sun, Z.; Isobe, H.; Tokuyama, H.	4. 巻 29
2. 論文標題 Synthesis of 9,10-Diarylanthracenes via Mg(TMP) <sub>2</sub> LiCl-Mediated Benzyne Generation/[4+2] Cycloaddition and Deoxygenation of 9,10-Epoxyanthracene Intermediates	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Synlett	6. 最初と最後の頁 513-518
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1055/s-0036-1591510	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 Pham, S.-T.; Ikemoto, K.; Suzuki, K. Z.; Izumi, T.; Taka, H.; Kita, H.; Sato, S.; Isobe, H.; Mizukami, S.	4. 巻 6
2. 論文標題 Magneto-electroluminescence effects in the single-layer organic light-emitting devices with macrocyclic aromatic hydrocarbons	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 APL Mater.	6. 最初と最後の頁 26103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5021711	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 Sun, Z.; Matsuno, T.; Isobe, H.	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Stereoisomerism and structures of rigid cylindrical cycloarylenes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Bull. Chem. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20180051	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60件 (うち招待講演 27件 / うち国際学会 20件)

1. 発表者名 佐藤宗太, 芳井朝美, 高橋さつき, 古海誓一, 竹内正之, 磯部寛之
2. 発表標題 キラル筒状分子の二重らせん型集積とキラル光学特性
3. 学会等名 Symposium on 2018 Molecular Chirality
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sato, S.; Yoshii, A.; Takahashi, S.; Furumi, S.; Takeuchi, M.; Isobe, H.
2. 発表標題 Chiral Intertwined Spirals and Chiroptical Properties Dictated by Cylinder Helicity
3. 学会等名 24th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC24) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ikemoto, K.; Kobayashi, R.; Sato, S.; Isobe, H.
2. 発表標題 Synthesis and Structures of Nanometer-sized Geodesic Phenylene Bowl
3. 学会等名 24th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC24) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 分子の穴から見た物理科学：一合成屋の試み
3. 学会等名 理研シンポジウム：第13回有機合成化学のフロンティア（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Isobe H.
2. 発表標題 Physics seen through macrocyclic molecules: An approach of a synthetic organic chemist
3. 学会等名 Seminar by Department of Chemistry, the Chinese University of Hong Kong（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Matsuno, T.; Kamata, S.; Sato, S.; Yokoyama, A.; Sarkar, P.; Isobe, H.
2. 発表標題 Assembly, Thermodynamics and Structures of a Two-wheeled Composite of a Dumbbell-shaped Molecule and Cylindrical Molecules with Different Edges
3. 学会等名 The Third International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic Molecules & Materials (CURO- 3)（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Isobe H.
2. 発表標題 Geometric design for curved M-systems
3. 学会等名 The Third International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic Molecules & Materials (CURO- 3)（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 池本晃喜, Jennie Lin, 小林良, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 1, 3, 5-三置換ベンゼン(フェニン)を構成要素としたサドル状ジオデシック芳香族炭化水素分子の合成と構造
3. 学会等名 第29回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 古樫加奈子, 松野太輔, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 らせん性を持つ湾曲 共役分子の自己集合における 拡張の効果
3. 学会等名 第29回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 芳井朝美, 佐藤宗太, 高橋さつき, 古海誓一, 竹内正之, 磯部寛之
2. 発表標題 キラル筒状分子の二重らせん型集積とキラル光学特性
3. 学会等名 第29回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松野太輔, 中井祐介, 佐藤宗太, 真庭豊, 磯部寛之
2. 発表標題 強固な筒状ホスト内での球状回転子の歯止めのない固体内慣性回転
3. 学会等名 第55回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 有機化学で拓くサステイナブル化学
3. 学会等名 東京工科大学「サステイナブル化学特別講演」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 有機分子の孔から物理を覗く：ナノカーボンモデル分子の科学
3. 学会等名 有機合成化学ミニシンポジウム千葉2018(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 大環状芳香族分子の薄膜・固体を活用した多能材料開発
3. 学会等名 第114回有機合成シンポジウム(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Geodesic Phenine Frameworks: First Steps
3. 学会等名 第18回蓼科会議(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Matsuno, T.; Nakai, Y.; Sato, S.; Maniwa, Y.; Isobe, H.
2. 発表標題 Ratchet-free solid-state inertial rotation of a guest ball in a tight tubular host
3. 学会等名 第18回薬科会議（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Rigid, cylindrical cycloarylenes: chirality and properties
3. 学会等名 AROMATICITY2018（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 福永隼也, 孫哲, 池本晃喜, 是常隆, 有田亮太郎, 佐藤宗太, 磯部 寛之
2. 発表標題 周期孔をもつ新しいナノチューブの化学合成
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 古樫加奈子, 松野太輔, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 湾曲芳香族パネルを用いた直径縮小らせん型カーボンナノチューブ分子
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木建, 藤野智子, 大井つぐみ, 磯部寛之
2. 発表標題 トリアゾール連結部を含むオリゴリボヌクレオチド類縁体: 多重鎖形成とその熱力学的解析
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Matsuno, T.; Nakai, Y.; Maniwa, Y.; Sato, S.; Fujita, M.; Fukunaga, K.; Isobe, H.
2. 発表標題 Construction and solid-state dynamics of supramolecular hydrocarbon bearings
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福永健悟, 藤田昌暉, 松野太輔, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 CH- 水素結合によるbowl-in-tube型超分子錯体の構築
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 美尾樹, 孫哲, 岡田朝彦, 松野太輔, 佐藤宗太, 河野裕彦, 磯部寛之
2. 発表標題 柔軟なシクロアリーレンホストと楕円体型ゲストからなる超分子錯体の構造と挙動
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 分子内環電流と円偏光発光
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会（特別企画講演）（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 分子でのぞく物理と化学
3. 学会等名 近畿大学サイエンス・シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 筒状分子の科学：合成・分子機械・それから・・・？
3. 学会等名 学習院大学理学部化学科講演会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Structure-based Exploration of Materials Science with Macrocyclic Aromatic Hydrocarbons
3. 学会等名 ISNA 2017 (17th International Symposium on Novel Aromatics) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 芳香族大環状分子の構造有機化学で探る新しい有機材料・分子物理：一合成屋の試み
3. 学会等名 富士フィルム株式会社講演会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Physics seen through cylindrical molecules: An approach of a synthetic chemist
3. 学会等名 北京大学化学与分子工程学院 Xing Da Lecture（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 有機化学で拓くサステイナブル化学
3. 学会等名 東京工科大学「サステイナブル化学特別講義」（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Physics seen through macrocyclic molecules: An approach of a synthetic organic chemist
3. 学会等名 Institut Des Sciences Chimiques de Rennes Equipe Chimie Organique et Interfaces Seminar（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Physics seen through macrocyclic molecules: An approach of a synthetic organic chemist
3. 学会等名 Universite Angers 講演会 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Exploring materials chemistry with unbiased macrocycles
3. 学会等名 Mini-symposium on Silicon Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 大環状分子の構造有機化学から探る新しい科学
3. 学会等名 JAIセミナー東京会場 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 大環状分子の構造有機化学から探る新しい科学
3. 学会等名 JAIセミナー大阪会場 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 大環状分子の材料科学
3. 学会等名 モルガンスタンレーMUFG証券会社 EV Day&Chemical Conference (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Viewing Science through Macrocycles: An approach of A Synthetic Organic Chemist
3. 学会等名 Molecular Frontier Lecture (ICCAS (中国科学院科学研究所)) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Viewing Science through Macrocycles: An approach of A Synthetic Organic Chemist
3. 学会等名 Molecular Frontier Lecture (Tsinghua University (清華大学)) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Isobe, H.
2. 発表標題 Viewing Science through Macrocycles: An approach of A Synthetic Organic Chemist
3. 学会等名 Molecular Frontier Lecture (Technical Institute of Physics and Chemistry (中国科学院理化技_研究所)) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 大環状分子で探る物理科学：ある有機化学者のアプローチ
3. 学会等名 「分子技術」シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 磯部寛之
2. 発表標題 ナノカーボン・インスパイアード分子からの材料開拓
3. 学会等名 第10回ナノカーボン実用化推進研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Matsuno, T.; Sato, S.; Yokoyama, A.; Kamata, S.; Isobe, H.
2. 発表標題 Self-Sorting of Two Hydrocarbon Receptors with One Carbonaceous Ligand
3. 学会等名 Gordon Research Conference (Artificial Molecular Switches & Motors) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 泉倫生, 薛ジン, 池本晃喜, 高秀雄, 北弘志, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 大環状芳香族炭化水素を用いた高効率有機ELデバイスの開発
3. 学会等名 有機EL討論会 第24回例会
4. 発表年 2017年

1 . 発表者名 Matsuno,T.; Sato,S.; Kamata,S.; Isobe,H.
2 . 発表標題 Chiral Self-Sorting of Tubular Hydrocarbon Receptors Solely by Van Der Waals Forces
3 . 学会等名 Chirality 2017 ISCD-29 ( 国際学会 )
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 Ikemoto,K.; Xue, J.Y.; Isumi,T.; Yoshii, A.; Tian, Y.; Kobayashi, R.; Koretsune, T.; Akashi, R.; Arita, R.; Taka, H.; Kita, H.; Sato, S.; Isobe, H.
2 . 発表標題 Aromatic Hydrocarbon Macrocycles for Highly Efficient Single-layer Organic Light-emitting Devices
3 . 学会等名 ISNA 2017 (17th International Symposium on Novel Aromatics) ( 国際学会 )
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 Sato,S.; Unemoto,A.; Ikeda,T.; Orimo,S.; Isobe,H.
2 . 発表標題 High-Capacity Negative Electrodes Materials with Macrocyclic Nanochannels for All-Solid-State Lithium Rechargeable Batteries
3 . 学会等名 ISNA 2017 (17th International Symposium on Novel Aromatics) ( 国際学会 )
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 Sun, Z.; Sarkar, P.; Suenaga, T.; Sato, S.; Kotani, M.; Isobe, H.
2 . 発表標題 Structural Chemistry of Belt-shaped Cyclonaphthylenes
3 . 学会等名 ISNA 2017 (17th International Symposium on Novel Aromatics) ( 国際学会 )
4 . 発表年 2017年

1. 発表者名 池本晃喜, 小林良, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 ナノメートルサイズのジオデシックフェニレンボウルの合成と構造
3. 学会等名 第28回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松野太輔, 鎌田翔, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 ファンデルワールス力による筒状炭化水素分子のキラリティ選別
3. 学会等名 第28回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 芳井朝美, 池本晃喜, 泉倫生, 北弘志, 高秀雄, 是常隆, 有田亮太郎, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 高性能電荷輸送材料として機能するドナー・アクセプター部位導入型シクロメタフェニレンの設計・合成
3. 学会等名 第28回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 池本晃喜, 小林良, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 Aromatic hydrocarbon macrocycles: from device application to nanometer-sized molecular architecture
3. 学会等名 第2回大津会議合同研究発表会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松野太輔, 佐藤宗太, 横山温和, 鎌田翔, 磯部寛之
2. 発表標題 Self Sorting of Two Hydrocarbon Receptors with One Carbonaceous Ligand
3. 学会等名 第2回大津会議合同研究発表会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Matsuno T.; Kamata S.; Sato S.; Yokoyama A.; Sarkar P.; Hiroyuki I.
2. 発表標題 Assembly, thermodynamics and structures of a two-wheeled composite of a dumbbell- shaped molecule and cylindrical molecules with different edges
3. 学会等名 第17回蓼科会議
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Fujino T.; Suzuki T.; Okada K.; Kogashi K.; Yasumoto K.; Sogawa K.; Isobe H.
2. 発表標題 Chimeric RNA oligonucleotides: Synthesis and function as mRNA in cell-free translation reactions
3. 学会等名 ISNAC2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 佐藤宗太, 宇根本篤, 池田卓史, 折茂慎一, 磯部寛之
2. 発表標題 ナノチャンネルをもつ大環状芳香族分子の結晶によるリチウムイオン電池の大容量負極材料
3. 学会等名 第58回電池討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Sun, Z.; Miyamoto, N.; Sato, S.; Tokuyama, H.; Isobe, H.
2. 発表標題 An Obtuse-angled Corner Unit for Fluctuating Carbon Nano hoops
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ikemoto, K.; Kobayashi, R.; Sato, S.; Isobe, H.
2. 発表標題 Synthesis and Molecular Recognition of Nanometer-sized Geodesic Phenylene Bowl
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 古樫加奈子, 松野太輔, 佐藤宗太, 磯部寛之
2. 発表標題 らせん性をもつ湾曲 共役分子の自己集合における 拡張の効果
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤宗太, 芳井朝美, 高橋さつき, 古海誓一, 竹内正之, 磯部寛之
2. 発表標題 キラル筒状分子の二重らせん型集積とキラル光学特性
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松野太輔, 鎌田翔, 佐藤宗太, 横山温和・サルカール パラントップ, 磯部寛之
2. 発表標題 末端構造の異なる筒状分子とダンベル状分子からなる二輪型複合体の形成・熱力学・構造
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Matsuno, T.; Sato, S.; Isobe, H.	4. 発行年 2017年
2. 出版社 Elsevier	5. 総ページ数 311-328
3. 書名 Comprehensive Supramolecular Chemistry II, Vol 3	

〔産業財産権〕

〔その他〕

物理有機化学研究室 <a href="http://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/physorg/">http://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/physorg/</a>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	河野 裕彦  (Kono Hirohiko)  (70178226)	東北大学・理学研究科・教授    (11301)	

## 6. 研究組織（つづき）

	氏名 (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	中井 祐介  (Nakai Yusuke)  (90596842)	兵庫県立大学・物質理学研究科・准教授     (24506)	