

令和 5 年 6 月 26 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2017～2021

課題番号：17H06119

研究課題名(和文) ナノスケールラボラトリーの創製と深化

研究課題名(英文) Creation and Development of Nanoscale Laboratory

研究代表者

村田 靖次郎 (Murata, Yasujiro)

京都大学・化学研究所・教授

研究者番号：40314273

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 160,100,000円

研究成果の概要(和文)：我々の身近に存在する物質の一部は分子から構成されているが、分子単体の性質はバルクのものとは大きく異なる場合が多く、物性の真の理解を妨げている場合がある。本研究は、有機合成法を駆使することによって「ナノサイズのフラスコ」を自在に実現させ、これを利用して、バルクの物質とは全く異なる単分子の性質を明らかにする「ナノスケールラボラトリー」を構築し、物性科学における新しい学理を創成するものである。

研究成果の学術的意義や社会的意義

中空の炭素クラスターであるフラーレンを出発原料として、温和な条件下における開口部形成反応と開口部拡大反応を開発し、ナノサイズの分子フラスコを構築した。その内部に1個あるいは2個の小分子を挿入し、分子錯体ならびに分子性固体としての物性を評価した。一方、開口部の構造修飾反応を開発することによって、拡張フラーレン・開口フラーレン二量体・拡張ナノカーボン分子の合成経路を開発した。

研究成果の概要(英文)：Some of the substances around us are composed of molecules, but the properties of individual molecules often differ greatly from those of the bulk, which hinders our true understanding of physical properties. In this research, by making full use of organic synthesis methods, a "nano-sized flask" can be realized at will leading to create new theories in condensed matter science.

研究分野：総合理工

キーワード：ナノ構造科学 構造有機化学 単分子科学 フラーレン 開口フラーレン 内包フラーレン ナノカーボン分子

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

フラーレン C_{60} の内部は、 π 電子に取り囲まれた球状の特異な空間であり、小分子が内包されるのに最適な大きさである。これまで、He, Ne 等の希ガス、あるいは N, P の単原子が極めて低収率 (0.1-0.01%) で、極めて過酷な条件下 (650 °C の高温条件、あるいはイオンビーム照射) のみ C_{60} の内部に挿入可能なことが知られている (Saunders, M. et al., *Science* **1996**, 271, 1693.)。また、金属イオンを内包したフラーレンはアーク放電法にて発生され、多大な労力を伴う分離精製の後少量が得られるのみである (Yang, S.; Wang, C.-R. *Endohedral Fullerenes from Fundamentals to Applications*, World Scientific, Singapore, 2014.)。このような合成手法における制約のため、電気的・磁氣的に興味ある化学種を内部にもつ新しい内包フラーレンを自在に創成し、その物性を検討する研究はほとんど未開拓である。もし、フラーレンの σ 骨格を自在に切断して開口部を設け、そこから任意の化学種を内部に挿入し、その後開口部を修復するという「分子手術法」(右図)が開発されれば、内包フラーレン、ならびに内包化学種の科学にブレークスルーをもたらすことができる。



これまで申請者らは、水素分子を内包したフラーレン C_{60} の合成を実現させることによって、この「分子手術法」が未踏の内包フラーレン合成に有用であることを世界に先駆けて報告した (*Science* **2005**)。さらに、水素結合を持たない水単分子を内包した C_{60} の合成をも達成した (*Science* **2011**)。この分子手術法は、内部空間のより大きな高次フラーレンへの適用も可能である。すなわち、 C_{70} では2個の水素分子内包が可能であり (*JACS* **2008**)、より大きな水の二量体でさえも C_{70} 内部に内包できる (*Nature Chem.* **2016**)。さらに、本手法と窒素プラズマ反応条件を組み合わせることによって、初めて異種2原子 (He と N: 窒素原子は四重項ラジカル) を内包させたフラーレンを発生させることに成功している (*Nature Commun.* **2013**)。

開口フラーレンの合成と内部への小分子導入に関しては、Rubin 教授 (米国)、Gan 教授 (中国)、岩松 准教授 (名古屋大) らの報告もあるが、申請者らのグループのみが開口部を修復して内包フラーレンの合成を達成している。一方、申請者らと密接に研究を行ってきた Whitby 教授 (英国) らの研究グループ (先方のポストドクを受け入れ、開口フラーレンの合成・小分子挿入・開口部修復の技術を伝えていた) が、申請者らの開口フラーレンを用いて最近独自の研究活動を行い、HF を内包した C_{60} の合成を報告している (Whitby, R. J. et al., *Nature Chem.* **2016**, 8, 953.)。このような状況の下、「分子手術」における日本の優位性を更に高め、これを用いて新しい学理を構築し、これまでに無い機能性材料を創製するため、本研究提案を行った。一方、本研究を遂行中に、 CH_4 を内包した C_{60} の合成が既出の競合グループから報告されている (Whitby, R. J. et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 5038.)。

分子手術法により初めて合成される分子内包フラーレンは、サブナノスケールの空間に1個あるいは2個の化学種を閉じ込めることができる「ナノフラスコ」と見なすことができ、孤立単分子の性質を検討する絶好のモデルとなる。内包化学種は外界から完全に隔離されており、分子間相互作用を極限まで小さくした系を、固体あるいは溶液状態で検討することが初めて可能となった。これは、従来では主に、気相や極低温でのマトリックス中でのみ検討が行われてきた小分子の基礎物理化学に新しい方法論を提供するものである。その結果、申請者らは小分子の物性研究新風を吹き込んできた (*JACS* **2006**, *JACS* **2007**, *JACS* **2008**, *JACS* **2008**, *PRL* **2009**, *PRL* **2009**, *JACS* **2010**, *JACS* **2011**, *JPCL* **2012**, *JACS* **2012**, *PNAS* **2012**, *PCCP* **2014**, 等)。

2. 研究の目的

本研究は、有機合成法を駆使することによって「ナノフラスコ」を自在に実現させ、これを利用して、バルクの物質とは全く異なる単分子の性質を明らかにする「ナノスケールラボラトリー」を構築し、新しい学理を創成するものである。中空のフラーレンは、その基礎物性に興味を持たれているばかりではなく、有機太陽電池等の次世代有機デバイスや生理活性物質としての利用が期待されている。本研究計画において合成できる内包フラーレンは、 π 共役系分子の内部に電気双極子や磁気双極子が挿入された構造をもつ。すなわち、本研究で開発する手法は、分子の外形を全く変化させずに、その分子に新しい物性と機能を付与することができるため、従来法とは全く異なるナノカーボンの「官能基化」とも考えられる。これらの物質は、アーク放電や化学気相成長法などの物理的な手段では制御合成が不可能なものであり、オンリーワン技術をもつ申

請者らが研究を推進することによって、初めて実現が可能となる物質群である。

3. 研究の方法

フラーレンに対する開口部形成反応と開口部拡大反応を新たに開発し、ナノサイズの分子フラスコを構築した。その内部に小分子を挿入し、分子錯体ならびに分子性固体としての物性を評価した。一方、開口部修飾反応を開発することによって、拡張フラーレンや開口フラーレン二量体等の新しいナノカーボン分子の合成経路を確立した。具体的な成果を以下に記す。

4. 研究成果

(1) 開口フラーレン C₆₀ 誘導体への常磁性一酸化窒素分子の導入: 有機電子スピンの創製

電子スピン系は分子磁性や医療・量子デバイスなどの広い分野から注目を集めている。従来の電子スピン系は主に毒性をもつ金属に依存しており、軽元素のみから構成される物質設計が求められている。本研究では、開口C₆₀ 誘導体の内部に常磁性をもつ一酸化窒素分子を導入することで、優れた結晶性・溶解性を併せもつ有機電子スピン系の構築を目指した。

まず 開口 C₆₀ 誘導体1を C₆₀ から4段階で合成した。粉末状の1に、高圧 NO ガス (28 atm) を接触させた後、すぐに2等量の BH₃・THF を作用させることで、開口部上のカルボニル基の1つを OH 基へと還元した。その結果、67%の収率で NO@2 が得られ (Scheme 1)、NaBH₄ を還元剤として用いる場合よりも収率が大きく向上した。

NO@2 は Buckyprep カラムによって、他の内包体と分離することが可能であり、内包率を95%まで高めることができた。興味深いことに、NO@2 は常磁性分子であるにもかかわらず、シャープな ¹H NMR シグナルを示すことがわかった。また、NO 分子を内包したことによって、¹H NMR において化学シフトの温度依存性が観測され、測定温度の降下にともなって高磁場側へシフトすることがわかった。解析の結果、擬コンタクトシフトと Fermi コンタクトシフトの両方が常磁性化学シフトに寄与していることがわかった。また、NO@2 の単結晶X線構造解析の結果、内包されている NO 分子は N が上向き・下向きの2つのコンフォメーションに由来するディスオーダーが観測され、その存在比は 0.55:0.35 と最適化された (Figure 1)。これは、100 K においても NO 分子が内部で自由回転していることを示している。一般的に、NO 分子は分子本来がもつ軌道角運動量の影響で、ゼオライトやアルゴンマトリックス中など対称性が崩れる環境下においてのみ ESR シグナルが観測される。粉末状の NO@2 の ESR 測定の結果、40 K 以下の極低温下においてブロードニングしたシグナルが観測された。これは、NO 分子が C₁ 対称の炭素骨格に内包されたことに起因すると考えられる。すなわち、本電子スピン系は、結晶性・溶解性に優れ、従来の常磁性分子では考えられない ESR・NMR の両方に活性をもつ分子であることがわかった。さらに、フラーレン内部でラジカル種が自由回転している特殊な超分子錯体であることがわかった。

Scheme 1. Synthesis of NO@2

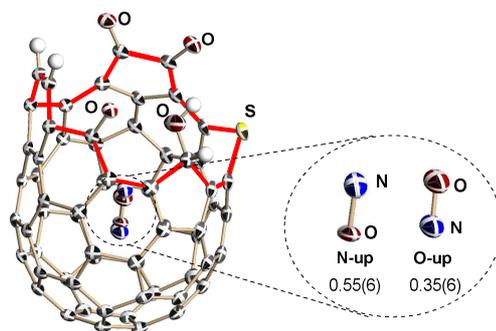
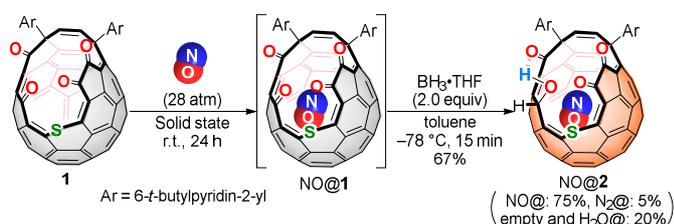
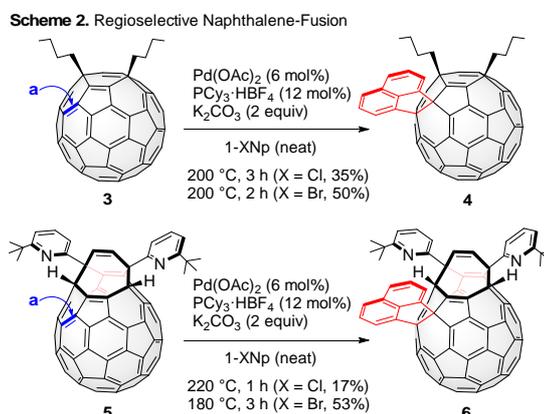


Figure 1. X-ray structure of NO@2. Aryl groups and NiOEP are omitted for clarity. Thermal ellipsoids are set at 50% probability.

(2) Pd 触媒を用いたフラレン誘導体の位置選択的構造修飾

フラレン C₆₀ の構造修飾法の1つとして遷移金属触媒を用いた反応が多く報告されている中で、位置選択的な反応は非常に限られている。我々は、パラジウム触媒存在下ハロゲン化アリールが C₆₀ 上で5員環を介して環化する反応を見出した。この反応はアルキルプロマイドの種類によらず50%程度の収率で進行することがわかった。また、1-ハロナフタレン中で1,4-ジアルキル C₆₀ 誘導体 **3** を反応させたところ、HOMO の軌道係数が最も高い二重結合 **a** 上で選択的にナフタレンが縮環し、**4** を与えることがわかった (Scheme 2)。同様の反応は開口 C₆₀ 誘導体 **5** および水分子内包体 (H₂O@**5**) においても進行し、H₂O@**6** の構造は単結晶X線構造解析により明らかにされた。さらに、Pd 触媒存在下での C₆₀ におけるナフタレン縮環過程を理論計算により検証した結果、6員環遷移状態を経由する協奏的なメタリ化 - 脱プロトン化過程が律速段階であることが示された。



(3) 開口フラレン誘導体とホスフィンとの反応によるベタイン体の生成と二量体の合成

ホスフィン是一般式 PR₃ で表される化合物であり、同族元素誘導体であるアミンと同様に求核性をもつ一方で、優れた脱離能を示すことから、炭素 - 炭素結合形成や環化反応の触媒として1990年以降盛んに研究されてきた。これらの反応では、α,β-不飽和カルボニル部位への phospho-Michael 付加反応を起点とし、対応するホスホニウムベタイン体が生成すると考えられているが、その Michael 付加体 **A** の単離に成功した例は2010年の1例のみに限られており、反応機構解析についても大きく立ち遅れている (Scheme 3)。また、1960年代から、ホスフィンと1,2-ジカルボニル化合物との反応により、Kukhtin-Ramirez 付加体 **B** を経由して、リンイリド体が生成することが知られているが、提案されている反応機構には議論の余地がある。本研究では、以下の検討を行ない、新規生成物の構造とその反応機構を明らかにした。

1. ベタイン体の生成
開口体 **7** と PMe₃ との室温条件での反応により、ベタイン体 **8** を合成し、その固体構造を明らかにした (Figure 2)。これは、phospho-Michael 付加体を単離した極めて貴重な例である。

2. リンイリド体の合成

150 °C の加熱条件下、**7** を種々のホスフィンと反応させることでリンイリド体 **9** が選択的に生成することがわかった。特に、PPh₃ との反応では、生成物の構造は単結晶X線構造解析により明らかにされた。

3. オレフィン架橋型開口 C₆₀ 二量体

さらに PMe₃ を用いた **7** の分子間反応により、二重結合により連結された二量体 **10** がホモキラル選択的に得られた。その単結晶X線構造解析の結果、**10** は異種化学種を内包した初めての開口二量体であることがわかった。

4. ヘテロキラル認識 C₆₀ 二量体

二量体 **10** と PMe₃ との反応により架橋二重結合が水素化された二量体を得ることが明らかになった。この化合物は、benzene-d₆ 溶液中および結晶中において、ヘテロキラル認識による超分子構造をもつことがわかった。

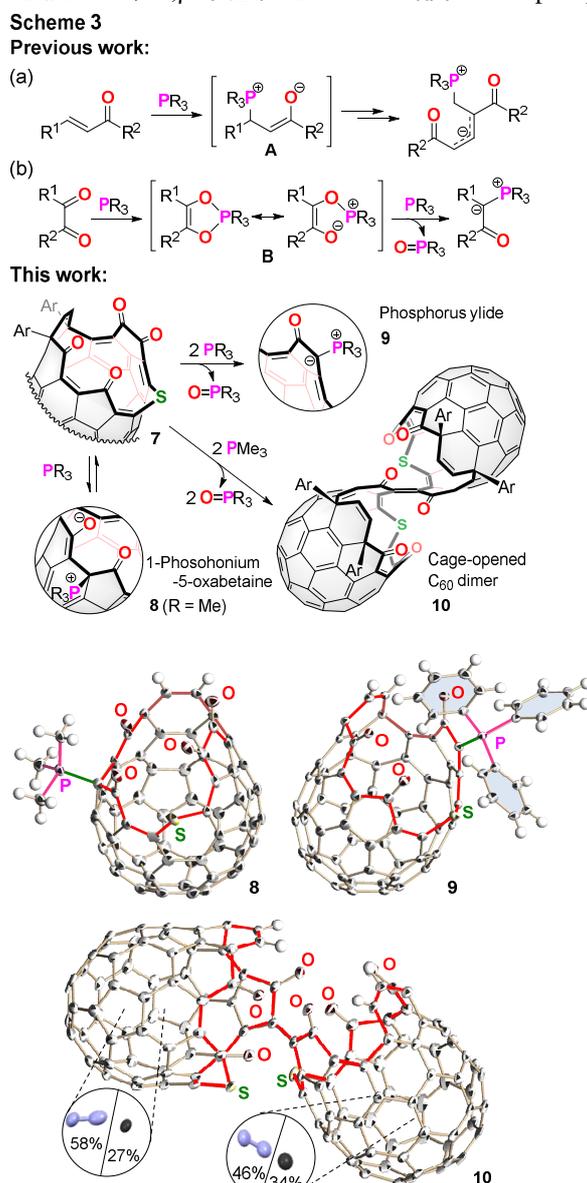


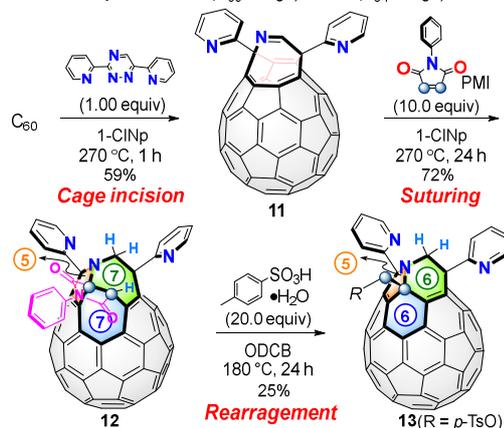
Figure 2. X-ray structures of **8**, **9**, and **10**.

(4) 拡張フラレン骨格の合理的な合成法の開発

容易に得られる C_{60} や C_{70} 等のフラレン骨格がさらに炭素によって拡張された新しいフラレンは、炭素棒のアーキ放電法により微量が生成し、多大な労力を必要とする単離操作の後に、極少量が単離できることが知られている。もし、 C_{60} や C_{70} 等の市販のフラレンから合理的な手法でケージ構造を拡張することが可能となれば、これまでに無い新しいフラレン骨格が実現され、拡張された炭素骨格内部を利用した科学を発展できるものと期待される。

今回、イミン部位をもつ開口 C_{60} 誘導体 **11** と *N*-フェニルフルイミド (PMI) との熱反応を検討したところ、開口部を渡環する付加反応が進行し、拡張されたフラレン骨格をもつ **12** が72%の高収率で合成できることを見出した (Scheme 4)。**12** の構造は単結晶X線構造解析によって決定され、拡張された部位は5員環ならびに7員環が縮環された構造をもち、 $C_{65}N$ のケージ構造が実現されたことが分かった。さらに、この化合物を酸の存在下で加熱することによって、拡張フラレン骨格部位から1炭素分の脱離が進行し、 $C_{64}N$ 骨格へと変換されることが明らかとなった。さらに、この拡張フラレン内部に水分子を閉じ込めること、ならびに、 C_{70} を原料とすることによって、拡張 $C_{75}N$ 骨格を実現することにも成功した。

Scheme 4. Synthesis of **12** ($C_{65}N$ cage) and **13** ($C_{64}N$ cage)



(5) ダブルホールフラレン、ならびに C=C 結合切断による π 拡張型開口フラレンの合成

フラレン誘導体に対する 2 個目の付加反応は、立体障害を避ける傾向はあるものの位置選択性に乏しいことが知られている。そのため、2 個の開口部をもつダブルホール誘導体は 40 種類以上の位置異性体の混合物であり、その単離と構造決定は困難であるものと長年思いこんでしまっていた。しかし、本研究において検討したところ、3 つの異性体が 19-27% という圧倒的な収率で生成しており、その単離と構造決定に成功し、直線型ならびに曲がったパイプ状の構造であることがわかった。

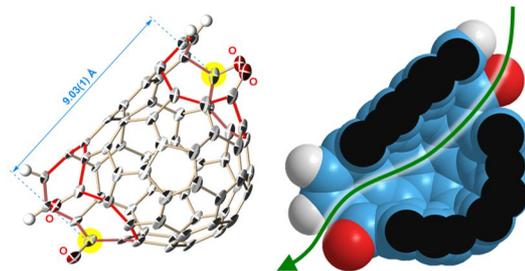


Figure 3. X-ray structure of double-holed fullerene.

開口体の開口部における反応性を検討している過程において、芳香族ジアミン誘導体が、フラレン骨格の C=C 結合の切断を伴って反応し、フラレンの π 共役系がジアミン部分と連結された誘導体が見出された。この誘導体はその内部にジアミン由来するアンモニア分子を取り込むことが可能であり、そのアンモニア分子は、開口体から放出されると、その開口部と反応することを明らかにした。これは、反応剤を不活性化したままで望みの場所へ運び、そこで初めて化学反応を起こさせるというモデル系である。

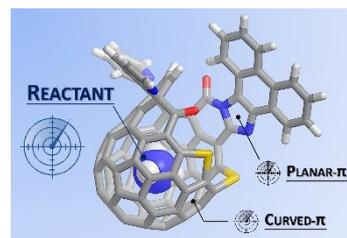


Figure 4. NH_3 -Encapsulating open-fullerene with the expanded π -conjugation.

開口フラレン誘導体は、キラルな構造を持っている。そこでエナンチオマーをキラル HPLC カラムにより単離し、その CD スペクトルを測定したところ、有機分子としては極めて大きな非対象性因子 g 値を持つことが明らかとなった。さらに、開口体の共役系を拡大することによって、近赤外部に吸収をもち、かつ巨大な g 値をもつ化合物を合成することに成功した。これは新しいキロプティカル特性を有する π 共役系化合物の新しい合成コンセプトを提供するものである。

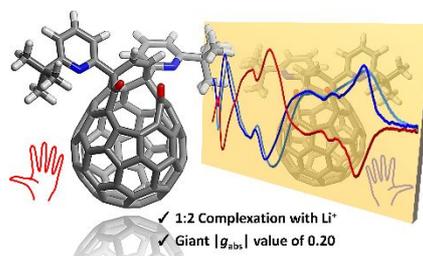


Figure 5. Chiral open-fullerene.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計68件（うち査読付論文 68件 / うち国際共著 8件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 49
2. 論文標題 A Single H ₂ O Molecule inside Hydrophobic Carbon Nanocavities: Effect of Local Electrostatic Potential	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 244 ~ 247
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.190874	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 Hashikawa Yoshifumi, Okamoto Shu, Murata Yasujiro	4. 巻 3
2. 論文標題 Organophosphorus zwitterions engaged in a conjugated macrocycle on fullerene	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 90
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-020-00340-x	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 Sakakibara Keita, Wakiuchi Araki, Murata Yasujiro, Tsujii Yoshinobu	4. 巻 11
2. 論文標題 Precise synthesis of double-armed polymers with fullerene C ₆₀ at the junction for controlled architecture	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Polymer Chemistry	6. 最初と最後の頁 4417 ~ 4425
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0py00458h	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 Dinse Klaus-Peter, Kato Tatsuhisa, Hasegawa Shota, Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro, Bittl Robert	4. 巻 1
2. 論文標題 EPR study of NO radicals encased in modified open C ₆₀ fullerenes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Magnetic Resonance	6. 最初と最後の頁 197 ~ 207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5194/mr-1-197-2020	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hashikawa Yoshifumi、Kizaki Kazuro、Hirose Takashi、Murata Yasujiro	4. 巻 10
2. 論文標題 An orifice design: water insertion into C60	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 40406 ~ 40410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0ra09067k	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 Hashikawa Yoshifumi、Shimizu Yuma、Murata Yasujiro	4. 巻 22
2. 論文標題 Synthesis of a Dihydroxylated Open-Cage [70]Fullerene by a Reductive Ring-Closure Reaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 8624 ~ 8628
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.0c03216	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 Hashikawa Yoshifumi、Murata Yasujiro	4. 巻 11
2. 論文標題 Cation recognition on a fullerene-based macrocycle	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 12428 ~ 12435
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0sc05280a	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 Hashikawa Yoshifumi、Fushino Teppei、Murata Yasujiro	4. 巻 142
2. 論文標題 Double-Holed Fullerenes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 20572 ~ 20576
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.0c10676	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 Hashikawa Yoshifumi, Hasegawa Shota, Murata Yasujiro	4. 巻 60
2. 論文標題 Precise Fixation of an NO Molecule inside Carbon Nanopores: A Long Range Electron Nuclear Interaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 2866 ~ 2870
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202012538	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 Zhang Sheng, Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 143
2. 論文標題 Cage-Expansion of Fullerenes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 12450 ~ 12454
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.1c05778	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 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 25
2. 論文標題 Probing the Regioselectivity with Encapsulated H ₂ : Diels-Alder Reaction of an Open Cage C ₆₀ Derivative with Anthracene	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 2482-2485
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201806030	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 Hal, Nakano Motohiro, Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 10
2. 論文標題 Rotational Motion and Nuclear Spin Interconversion of H ₂ O Encapsulated in C ₆₀ Appearing in the Low-Temperature Heat Capacity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1306-1311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.9b00311	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 Fujii Shintaro, Cho Haruna, Hashikawa Yoshifumi, Nishino Tomoaki, Murata Yasujiro, Kiguchi Manabu	4. 巻 21
2. 論文標題 Tuneable single-molecule electronic conductance of C60 by encapsulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 12606-12610
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cp02469g	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 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 49
2. 論文標題 A Single H2O Molecule inside Hydrophobic Carbon Nanocavities: Effect of Local Electrostatic Potential	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 244-247
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.190874	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 Hashikawa Yoshifumi, Okamoto Shu, Murata Yasujiro	4. 巻 3
2. 論文標題 Organophosphorus zwitterions engaged in a conjugated macrocycle on fullerene	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 90/1-90/7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-020-00340-x	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 Sakakibara Keita, Wakiuchi Araki, Murata Yasujiro, Tsujii Yoshinobu	4. 巻 11
2. 論文標題 Precise synthesis of double-armed polymers with fullerene C60 at the junction for controlled architecture	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Polymer Chemistry	6. 最初と最後の頁 4417 ~ 4425
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0py00458h	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 Dinse Klaus-Peter, Kato Tatsuhisa, Hasegawa Shota, Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro, Bittl Robert	4. 巻 1
2. 論文標題 EPR study of NO radicals encased in modified open C60 fullerenes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Magnetic Resonance	6. 最初と最後の頁 197 ~ 207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5194/mr-1-197-2020	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hashikawa Yoshifumi, Kizaki Kazuro, Hirose Takashi, Murata Yasujiro	4. 巻 10
2. 論文標題 An orifice design: water insertion into C60	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 40406 ~ 40410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0ra09067k	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 Hashikawa Yoshifumi, Shimizu Yuma, Murata Yasujiro	4. 巻 22
2. 論文標題 Synthesis of a Dihydroxylated Open-Cage [70]Fullerene by a Reductive Ring-Closure Reaction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 8624 ~ 8628
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.0c03216	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 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 11
2. 論文標題 Cation recognition on a fullerene-based macrocycle	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 12428 ~ 12435
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0SC05280A	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 Hashikawa Yoshifumi, Fushino Teppei, Murata Yasujiro	4. 巻 142
2. 論文標題 Double-Holed Fullerenes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 20572 ~ 20576
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.0c10676	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 Hashikawa, Y.; Yasui, H.; Kurotobi, K.; Murata, Y.	4. 巻 2
2. 論文標題 Synthesis and Properties of Open-Cage Fullerene C60 Derivatives: Impact of the Extended - Conjugation (Special Issue on -Conjugated System Bricolage (Figuration) toward Functional Organic Molecular Systems)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Mater. Chem. Front.	6. 最初と最後の頁 206-213
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7QM00449D	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 Zhu, G.-Z.; Liu, Y.; Hashikawa, Y.; Zhang, Q.-F.; Murata, Y.; Wang, L.-S.	4. 巻 9
2. 論文標題 Probing the Interaction between the Encapsulated Water Molecule and the Fullerene Cages in H2O@C60- and H2O@C59N-	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem. Sci.	6. 最初と最後の頁 5666-5671
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8sc01031e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hasegawa, S.; Hashikawa, Y.; Kato, T.; Murata, Y.	4. 巻 57
2. 論文標題 Construction of a Metal-Free Electron Spin System by Encapsulation of an NO Molecule inside an Open-Cage Fullerene C60 Derivative	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 12804-12808
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201807823	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 Strelnikov, D. V.; Jasik, J.; Gerlich, D.; Murata, M.; Murata, Y.; Komatsu, K.; Kappes, M. M.; Roithova, J.	4. 巻 122
2. 論文標題 Near- and Mid-IR Gas-Phase Absorption Spectra of H ₂ @C ₆₀ +He	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 17088-17095
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.8b06222	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hashikawa, Y.; Hasegawa, S.; Murata, Y.	4. 巻 54
2. 論文標題 A Single but Hydrogen-Bonded Water Molecule Confined in an Anisotropic Subnanospace	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 13686-13689
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cc07339b	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 Hashikawa, Y.; Murata, Y.	4. 巻 83
2. 論文標題 Wavelength-Dependent Efficiency of Sequential Photooxygenation: C=C Bond Cleavage on Open-Cage C ₆₀ Derivatives	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ChemPlusChem	6. 最初と最後の頁 1179-1183
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cplu.201800464	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 Kaneko, S.; Hashikawa, Y.; Fujii, S.; Murata, Y.; Kuguchi, M.	4. 巻 18
2. 論文標題 Single Molecular Junction Study on H ₂ @C ₆₀ : H ₂ is "Electrostatically Isolated"	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ChemPhysChem	6. 最初と最後の頁 1229-1233
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201700173	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 Hashikawa, Y.; Murata, M.; Wakamiya, A.; Murata, Y.	4. 巻 139
2. 論文標題 Palladium-Catalyzed Cyclization: Regioselectivity and Structure of Arene-Fused C60 Derivatives	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Am. Chem. Soc.	6. 最初と最後の頁 16350-16358
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b09459	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 Zhu, G.-Z.; Hashikawa, Y.; Liu, Y.; Zhang, Q.-F.; Cheung, L. F.; Murata, Y.; Wang, L. S.	4. 巻 8
2. 論文標題 High-Resolution Photoelectron Imaging of Cryogenically-Cooled C59N- and (C59N)22- Azafullerene Anions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. Lett.	6. 最初と最後の頁 6220-6225
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.7b03091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hashikawa, Y.; Murata, Y.	4. 巻 139
2. 論文標題 Facile Access to Azafullerenyl Cation C59N+ and Specific Interaction with Entrapped Molecules	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Am. Chem. Soc.	6. 最初と最後の頁 18468-18471
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b11322	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 Hashikawa Yoshifumi, Sadai Shumpei, Murata Yasujiro	4. 巻 59
2. 論文標題 Bilateral -extension of an open-[60]fullerene in a helical manner	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 6560 ~ 6563
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CC00784G	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 Sadai Shumpei, Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 25
2. 論文標題 -Extended Open-[70]Fullerenes with a Fused Azaacene	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 2815 ~ 2819
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.3c00726	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 Sadai Shumpei, Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 13
2. 論文標題 Open-[60]fullerene-aniline conjugates with near-infrared absorption	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 14575 ~ 14579
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3ra02113k	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 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 59
2. 論文標題 C2-insertion into a fullerene orifice	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 1645 ~ 1648
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cc06531b	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 Hashikawa Yoshifumi, Sadai Shumpei, Okamoto Shu, Murata Yasujiro	4. 巻 62
2. 論文標題 Near Infrared Absorbing Chiral Open [60]Fullerenes	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202215380
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202215380	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 Bri? Anamarija, Murata Yasujiro, Hashikawa Yoshifumi, Margeti? Davor	4. 巻 1272
2. 論文標題 Utilization of sym-tetrazines as guanidine delivery cycloaddition reagents. An experimental and computational study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Structure	6. 最初と最後の頁 134207 ~ 134207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molstruc.2022.134207	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hashikawa Yoshifumi, Fujikawa Nana, Murata Yasujiro	4. 巻 144
2. 論文標題 -Extended Fullerenes with a Reactant Inside	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 23292 ~ 23296
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c12259	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 Hashikawa Yoshifumi, Fujikawa Nana, Okamoto Shu, Murata Yasujiro	4. 巻 51
2. 論文標題 Phosphorus ylides of cage-opened sulphide [60]fullerene derivatives	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 17804 ~ 17808
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2DT03214G	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 Hashikawa Yoshifumi, Okamoto Shu, Sadai Shumpei, Murata Yasujiro	4. 巻 144
2. 論文標題 Chiral Open-[60]Fullerene Ligands with Giant Dissymmetry Factors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 18829 ~ 18833
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c09556	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 Hashikawa Yoshifumi, Sadai Shumpei, Li Jiayue, Okamoto Shu, Murata Yasujiro	4. 巻 51
2. 論文標題 Selective Addition of Aniline to a Cage-opened Diketo Anhydride Derivative of C ₆₀	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 949 ~ 952
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.220285	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 Antol Ivana, Glasovac Zoran, Murata Yasujiro, Hashikawa Yoshifumi, Margeti? Davor	4. 巻 7
2. 論文標題 Consecutive Utilization of Mechanochemical and Microwave Methods for the Synthesis of Boc 2 amino quinazolin 4(3H) ones and DFT Study of Mechanism 6 Diazaelectrocyclization Process	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ChemistrySelect	6. 最初と最後の頁 e202200633
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/slct.202200633	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 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 11
2. 論文標題 Aniline Mediated Imination and Reduction of a Cage Opened C60 Derivative	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Asian Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e202200357
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ajoc.202200357	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 Miki Koji, Dan Zhang Zi, Kaneko Kaho, Kakiuchi Yui, Kojima Kentaro, Enomoto Akane, Oe Masahiro, Nogita Kohei, Murata Yasujiro, Harada Hiroshi, Ohe Kouichi	4. 巻 3
2. 論文標題 Amphiphilic -cyclodextrin?fullerene complexes with photodynamic activity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials Advances	6. 最初と最後の頁 312 ~ 317
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1ma00743b	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 Hashikawa Yoshifumi、Kawasaki Hiroto、Murata Yasujiro	4. 巻 41
2. 論文標題 -Backbonding on Group 9 Metal Complexes Bearing an η^2 -(H ₂ O@C ₆ O) Ligand	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 354 ~ 359
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.1c00706	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 Zhang Sheng、Hashikawa Yoshifumi、Murata Yasujiro	4. 巻 11
2. 論文標題 Cage Opened C ₆ O Isomers with Different Reactivities	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Asian Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e202100676
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ajoc.202100676	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 Hashikawa Yoshifumi、Murata Yasujiro	4. 巻 20
2. 論文標題 Hydrogenation of cage-opened C ₆ O derivatives mediated by frustrated Lewis pairs	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Organic & Biomolecular Chemistry	6. 最初と最後の頁 1000 ~ 1003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1ob02316k	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 Huang Guanglin、Hasegawa Shota、Hashikawa Yoshifumi、Ide Yuki、Hirose Takashi、Murata Yasujiro	4. 巻 28
2. 論文標題 An H ₂ O ₂ Molecule Stabilized inside Open Cage C ₆ O Derivatives by a Hydroxy Stopper	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202103836
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202103836	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 Du Shaoqing, Hashikawa Yoshifumi, Ito Haruka, Hashimoto Katsushi, Murata Yasujiro, Hirayama Yoshiro, Hirakawa Kazuhiko	4. 巻 21
2. 論文標題 Inelastic Electron Transport and Ortho-Para Fluctuation of Water Molecule in H ₂ O@C ₆₀ Single Molecule Transistors	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 10346 ~ 10353
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.1c03604	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 Hashikawa Yoshifumi, Sadai Shumpei, Murata Yasujiro	4. 巻 23
2. 論文標題 Amino-Functionalized Cage-Opened C ₆₀ Derivatives	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 9586 ~ 9590
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.1c03798	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 Hashikawa Yoshifumi, Sadai Shumpei, Murata Yasujiro	4. 巻 23
2. 論文標題 Reductive Decarbonylation of a Cage-Opened C ₆₀ Derivative	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 9495 ~ 9499
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.1c03694	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 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 6
2. 論文標題 Synthesis and Oligomerization of CpM(CO) ₂	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 34137 ~ 34141
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c05739	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 Hashikawa Yoshifumi、Murata Yasujiro	4. 巻 86
2. 論文標題 Water Mediated Thermal Rearrangement of a Cage Opened C60 Derivative	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ChemPlusChem	6. 最初と最後の頁 1559 ~ 1562
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cplu.202100421	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 Suarez Margarita, Makowski Kamil, Lemos Reinier, Almagro Luis, Rodriguez Hortensia, Herranz Maria Angeles, Molero Dolores, Ortiz Orlando, Maroto Enrique, Albericio Fernando, Murata Yasujiro, Martin Nazario	4. 巻 86
2. 論文標題 An Androsterone H2@C60 hybrid: Synthesis, Properties and Molecular Docking Simulations with SARS Cov 2	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ChemPlusChem	6. 最初と最後の頁 972 ~ 981
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cplu.202000770	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 Ohmura Toshimichi, Morimasa Yohei, Ichino Tomoya, Miyake Yusuke, Murata Yasujiro, Suginome Michinori, Tajima Kunihiko, Taketsugu Tetsuya, Maeda Satoshi	4. 巻 94
2. 論文標題 Mechanism of 2,6-Dichloro-4,4'-bipyridine-Catalyzed Diboration of Pyrazines Involving a Bipyridine-Stabilized Boryl Radical	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1894 ~ 1902
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20210145	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 Hashikawa Yoshifumi, Kizaki Kazuro, Murata Yasujiro	4. 巻 57
2. 論文標題 Pressure-induced annulative orifice closure of a cage-opened C60 derivative	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 5322 ~ 5325
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cc01662h	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 Hashikawa Yoshifumi, Hasegawa Shota, Murata Yasujiro	4. 巻 23
2. 論文標題 Photochemical Orifice Expansion of a Cage-Opened C60 Derivative	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 3854 ~ 3858
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.1c00990	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 Horii Yoji, Suzuki Hal, Miyazaki Yuji, Nakano Motohiro, Hasegawa Shota, Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 23
2. 論文標題 Dynamics and magnetic properties of NO molecules encapsulated in open-cage fullerene derivatives evidenced by low temperature heat capacity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 10251 ~ 10256
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp00482d	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 Hashikawa Yoshifumi, Li Hui, Murata Yasujiro	4. 巻 27
2. 論文標題 Reactions of C60 with Pyridazine and Phthalazine	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 7507 ~ 7511
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202100711	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 Hashikawa Yoshifumi, Li Jiayue, Okamoto Shu, Murata Yasujiro	4. 巻 27
2. 論文標題 Reactions on a 1,2 Dicarbonyl Moiety of a Fullerene Skeleton	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 7235 ~ 7238
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202100640	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 Shugai A., Nagel U., Murata Y., Li Yongjun, Mamone S., Krachmalnicoff A., Alom S., Whitby R. J., Levitt M. H., Room T.	4. 巻 154
2. 論文標題 Infrared spectroscopy of an endohedral water in fullerene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124311 ~ 124311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0047350	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hashikawa Yoshifumi, Okamoto Shu, Murata Yasujiro	4. 巻 27
2. 論文標題 Nonclassical Abramov Products Formed on Orifices of Cage Opened C60 Derivatives	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 4864 ~ 4868
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202004035	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 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 49
2. 論文標題 A Single H2O Molecule inside Hydrophobic Carbon Nanocavities: Effect of Local Electrostatic Potential	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 244 ~ 247
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.190874	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 Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 141
2. 論文標題 H2O/Olefinic- Interaction inside a Carbon Nanocage	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 12928 ~ 12938
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b06759	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 Tsukao Masahiro, Hashikawa Yoshifumi, Toyama Nana, Muraoka Masahiro, Murata Michihisa, Sasamori Takahiro, Wakamiya Atsushi, Murata Yasujiro	4. 巻 7
2. 論文標題 Propeller-Shaped Aluminum Complexes with an Azaperylene Core in the Ligands	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganics	6. 最初と最後の頁 109 ~ 109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/inorganics7090109	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 Hal, Nakano Motohiro, Hashikawa Yoshifumi, Murata Yasujiro	4. 巻 10
2. 論文標題 Rotational Motion and Nuclear Spin Interconversion of H2O Encapsulated in C60 Appearing in the Low-Temperature Heat Capacity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1306 ~ 1311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.9b00311	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 Ayoub Ghada, Strukil Vjekoslav, Fabian Laszlo, Mottillo Cristina, Bao Huizhi, Murata Yasujiro, Moores Audrey, Margetic Davor, Eckert-Maksic Mirjana, Friscic Tomislav	4. 巻 20
2. 論文標題 Mechanochemistry vs. solution growth: striking differences in bench stability of a cimetidine salt based on a synthetic method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 CrystEngComm	6. 最初と最後の頁 7242 ~ 7247
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CE01727A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shimogawa Hiroyuki, Murata Yasujiro, Wakamiya Atsushi	4. 巻 20
2. 論文標題 NIR-Absorbing Dye Based on BF2-Bridged Azafulvene Dimer as a Strong Electron-Accepting Unit	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 5135 ~ 5138
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.8b02056	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30件(うち招待講演 16件/うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Guanglin Huang, Shota Hasegawa, Yuki Ide, Yoshifumi Hashikawa, Takashi Hirose, Yasujiro Murata
2. 発表標題 Synthesis of Open-Cage Fullerene C60 Derivatives Encapsulating a Hydrogen Peroxide Molecule
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 李輝、橋川祥史、廣瀬崇至、村田靖次郎
2. 発表標題 ジメチル-o-フェニレンジアミンによるフラレンC60誘導体の開口部拡大反応
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 二開口型フラレンC60誘導体の合成と反応性
2. 発表標題 貞井俊平、橋川祥史、廣瀬崇至、村田靖次郎
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Jiayue Li, Yoshifumi Hashikawa, Takashi Hirose, Yasujiro Murata
2. 発表標題 Synthesis and Properties of an Open-Cage Fullerene C60 Derivative Having a Carboxylic Anhydride Moiety
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Open-Cage Fullerene C60 Derivatives Encapsulating a Paramagnetic Molecule
3. 学会等名 235th ECS Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Holey Bucky: Synthesis, Structure, and Properties
3. 学会等名 The 18th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Putting Small Molecules into Open-Cage Fullerenes
3. 学会等名 1st International Conference on Noncovalent Interactions (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Holey Bucky: Synthesis, Structure, and Properties
3. 学会等名 -System Figuration European-Japanese Workshop 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Synthesis and Properties of Open-Cage Fullerene Derivatives
3. 学会等名 233rd ECS Meeting, 13-17 May 2018, Seattle Sheraton and Washington State Convention Center, Seattle, USA (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Organic Synthesis of Endohedral Fullerenes Encapsulating Small Molecules
3. 学会等名 The 19th International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters, 12-17 August 2018, Hangzhou International Conference Center, Hangzhou, China (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Endohedral Fullerenes Encapsulating Small Molecules
3. 学会等名 The 3rd PKU-WuXi AppTec Symposium of Organic Chemistry, 20 October 2018, Peking University, Beijing, P.R.China (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Open-Cage Fullerene Derivatives Having a Functional Molecule inside the Cage
3. 学会等名 The Workshop Pi-EJ2018, 4-7 Nov 2018, Hotel Ariston, Dubrovnik, Croatia (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Open-Cage Fullerenes toward the Synthesis of Endofullerenes and Heterofullerenes
3. 学会等名 Aromaticity 2018, 28 Nov-1 Dec 2018, Hotel Barcelo Maya Palace Deluxe, Cancun, Mexico (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Realization of Isolated Chemical Species by Organic Synthesis of Endohedral Fullerenes
2. 発表標題 Yasujiro MURATA
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会、2019年3月16-19日、甲南大学岡本キャンパス(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Organic Synthesis of Endohedral Fullerenes
3. 学会等名 Invited Lecture at Central South University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Organic Synthesis of Endohedral Fullerenes by Molecular Surgery
3. 学会等名 International Symposium on Pure & Applied Chemistry 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Synthesis of Endofullerenes by Molecular Surgery
3. 学会等名 2nd International Symposium on NanoCarbons (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yasujiro Murata, Rui Zhang, Michihisa Murata, Atsushi Wakamiya
2. 発表標題 Synthesis and Properties of Endohedral C70 Co-Encapsulating HF and H2O Molecules
3. 学会等名 17th International Symposium on Novel Aromatics
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yoshifumi Hashikawa, Michihisa Murata, Atsushi Wakamiya, Yasujiro Murata
2. 発表標題 Palladium-Catalyzed Regioselective Functionalization of C60
3. 学会等名 17th International Symposium on Novel Aromatics
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 橋川祥史、岡本脩生、村田靖次郎
2. 発表標題 含りん開口フラレン誘導体の合成
3. 学会等名 第31回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 黄光林、長谷川翔太、橋川祥史、井手雄紀、廣瀬崇至、村田靖次郎
2. 発表標題 A Role of a Hydroxy Stopper: Kinetic and Thermodynamic Stabilization of H ₂ O ₂ Encapsulated inside an Open-Cage C ₆₀ Derivative
3. 学会等名 第31回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yasujiro Murata
2. 発表標題 Holey Bucky: Synthesis, Structure, Properties, and Reactions
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Synthesis and Structures of Cage-Opened C ₆₀ Dimers
2. 発表標題 Yoshifumi Hashikawa, Shu Okamoto, Yasujiro Murata
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takashi Hirose, Tomohisa Koyama, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata
2. 発表標題 Chiroptical Properties of Pyrene Dimers Covalently Linked to a Helical π -Conjugation
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平翔太、廣瀬崇至、村田靖次郎
2. 発表標題 らせん型 共役系にピレンを導入した分子の合成と二重発光特性
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 貞井俊平、橋川祥史、村田靖次郎
2. 発表標題 還元的脱カルボニル化反応による開口フラレン誘導体の構造変換
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 Yoshifumi Hashikawa, Shu Okamoto, and Yasujiro Murata
2. 発表標題 Synthesis and Properties of Open-Cage Fullerene Derivatives Having a Phosphorus Functional Group
3. 学会等名 25th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Enhanced Polarity and Decreased LUMO Level of an Open-Cage C60 Derivative Induced by Encapsulation of CH3CN and Distortion of the Cage
2. 発表標題 Huang Guanglin, Yuki Ide, Yoshifumi Hashikawa, Takashi Hirose, Yasujiro Murata
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 貞井俊平、岡本脩生、橋川祥史、村田靖次郎
2. 発表標題 炭素 - 炭素結合切断による樽型 共役分子の構造変換
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 三宅優也、村田靖次郎、廣瀬崇至
2. 発表標題 n- 軌道間の斥力的相互作用に基づくドナー分子の設計と合成
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

https://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~kouzou/index.html 論文・著書 https://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~kouzou/2010_late.html

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------