科研費

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 5 月 2 9 日現在

機関番号: 14301 研究種目: 若手研究 研究期間: 2018~2019

課題番号: 18K14200

研究課題名(和文)弱い相互作用を用いた3次元 共役分子のナノ構造制御と機能開拓

研究課題名(英文)Nanostructural Control and Function Exploration of Weak-Interaction-Based Three-Dimensional Pi-Conjugated Molecules

研究代表者

橋川 祥史 (Hashikawa, Yoshifumi)

京都大学・化学研究所・助教

研究者番号:80804343

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文):本研究課題では,フラーレン骨格に小分子を導入することで,(1) 内包分子と負電荷を帯びた炭素ケージとの相互作用,(2) C1対称ケージに包摂されたNO分子の磁気特性評価,(3) 水素結合をもつ単一水分子の動的挙動と酸・塩基特性評価,(4) 内包水素分子を用いたDiels Alder反応における開口C60誘導体の位置選択性評価,(5) 単一水分子を用いたOH/ 相互作用の評価を行なった.

研究成果の学術的意義や社会的意義 分子内または分子間に働くアトラクティブな相互作用は,分子の配向制御や物性制御を実現する上で重要な構造 設計指針の1つであり,分野の垣根を越えた学理を支える大きな柱である。近年,さまざまな弱い相互作用の存 在が明らかとなりつつあるが,分子レベルにおける詳細な理解は進んでおらず,理論化学研究に大きく依存して いる、本研究課題では,単一分子のみを隔離可能な炭素ケージを創出し,分子レベルでその相互作用を評価する ことができ,長らく議論されてきたOH/ 相互作用の本質が水分子の配向で説明可能であることを見い出した。 これは,水分子を用いた機能性材料開発における分子設計に新たな指針を与えるものと期待される。

研究成果の概要 (英文): Using fullerene cages encapsulating a small molecule, we conducted evaluation of (1) interaction of encapsulated species and anionic cages, (2) magnetic properties of NO molecule inside a C1-symmetric cage, (3) dynamic behaviour and acid/base character of a single water molecule having H-bondings, (4) regioselectivity of the Diels-Alder reaction probed by an ecapsulated H2 molecule, and (5) OH/ interaction of a single water molecule trapped inside a fullerene cage.

研究分野: 物理化学

キーワード: 水分子 緩和時間 核磁気共鳴 電子スピン共鳴 フラーレン

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、研究者個人に帰属されます。

様 式 C-19、F-19-1、Z-19(共通)

1. 研究開始当初の背景

分子内または分子間に働くアトラクティブな相互作用は、分子の配向制御や物性制御を実現する上で重要な構造設計指針の1つであり、分野の垣根を越えた学理を支える大きな柱である.近年、弱い相互作用の代表格である古典的水素結合に加えて、ハロゲン結合・カルコゲン相互作用・CX- π 相互作用・r-r-r 相互作用などさまざまな弱い結合の存在が明らかとなりつつあるが、それらの分子レベルにおける詳細な理解は進んでおらず、理論化学研究に大きく依存している.

2. 研究の目的

フラーレン C_{60} は、有機化学的手法を用いて開口部を構築した後、さまざまな小分子を内部に導入することができる。これらの小分子は外界から完全に隔離されており、単一分子レベルにおいてその性質や反応性を調べることができる。そこで本研究課題では、開口フラーレン誘導体を用いて、弱い相互作用で構成された分子錯体を創製し、これをモデル分子として用いることで、溶液中だけでなく結晶中における構造特性を明らかにすることを目的とした。

3. 研究の方法

フラーレン C_{60} とアジン誘導体との熱反応により得られる開口 C_{60} 誘導体の開口部を拡大し、高圧下において内部に小分子を導入することで、望みの分子錯体を合成した。さらに、開口部の構造修飾法を新たに見い出し、水素結合をもつ単一水分子の隔離に成功した。その特異な回転運動および併進運動について、X 線構造解析・温度可変 NMR 測定・NMR 緩和時間測定などにより評価した。また、電子スピン化学種である NO 分子の導入にも成功し、その磁性について温度可変 NMR 測定および ESR 測定に基づき評価した。

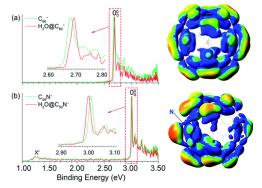
4. 研究成果

(1) 水分子と負電荷を帯びたフラーレンケージとの相互作用解析

Chem. Sci. 2018, 9, 5666–5671.

Selected as 2018 Chemical Science HOT Article

光電子分光法に基づき電子親和力を評価した結果、 $H_2O@C_{60}$ は C_{60} に比べ $0.0088\,eV$ 高い値をもつ一方で、 $H_2O@C_{59}N$ は $C_{59}N$ に比べ $0.0092\,eV$ 低い値をもつことがわかった。このことは、アニオン状態において、 H_2O と C_{60} の間にはクーロン引力が、 H_2O と $C_{59}N$ -との間にはクーロン反発が存在することを示し



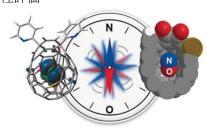
ている. つまり、 C_{60} ケージへの窒素原子のドープにより、フラーレン骨格内部の電子状態は大きく変化するといえる.

(2) C_1 対称のフラーレンケージに包摂された NO 分子の磁気特性評価

Angew. Chem., Int. Ed. 2018, 138, 4096-4104.

Selected paper in the special issue of ISNA-18: Novel Aromatics

フラーレン骨格内部への常磁性分子 (NO) の挿入に成功した. X 線構造解析の結果, NO は長軸方向を開口部に向けた配向をもつことがわかった. 通常, NO は軌道角運動量の影響に



より ESR 不活性であるが、 C_1 対称のフラーレン骨格に導入されたことに起因し、80 K 以下にお いて明確な ESR 信号が確認された. また, 温度可変 NMR 測定の結果, pseudo-contact および Fermi-contact 相互作用の両方の寄与に基づく常磁性シフトが観測された.

(3) 水素結合をもつ単一水分子の動的挙動と酸・塩基特性評価

Chem. Commun. 2018, 54, 13686-13689.

単一水分子を包摂した水酸化開口 Cm誘導体の合 成を行なった. X線構造解析の結果, 開口部上の水 酸基との水素結合に起因し,併進運動に基づく内包 水分子のディスオーダーが観測された. このこと は、本誘導体の内部空間が C₇₀ に匹敵するサイズを Single but H-bonded H₂0



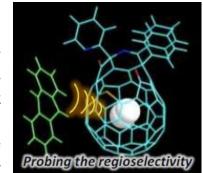
H₂O free from H-bondings

もつことを示している. 温度可変 NMR 測定および緩和時間測定の結果, 低温下では開口部上の 水酸基との水素結合により,内包された水分子の運動性が著しく低下することがわかった.また, H/D 交換実験を行なった結果,内包された水分子はバルク水と比べ less basic かつ less acidic で あることがわかった.

(4) 内包水素分子を用いた Diels-Alder 反応における開口 C₆₀ 誘導体の位置選択性評価 Chem.-Eur. J. 2019, 25, 2482-2485.

Selected paper in the special issue of ISNA-18: Novel Aromatics

開口 C60 誘導体は、ひずみのエネルギーの解消が期待され る開口部上において選択的に反応が進行するため、開口部以 外での反応例は極めて限られている. 開口部以外での反応性 について検討するために、開口 C₆₀ 誘導体とアントラセンと の Diels-Alder 反応を行なった. 内部に水素分子を内包した誘 導体を用いることにより, 生成した全ての誘導体の同定が可



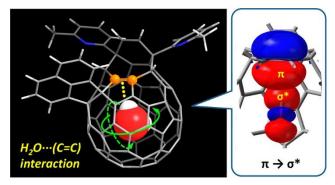
能となり、その位置選択性は trans-3 > trans-2 > e"の順に低下することがわかった.

(5) 単一水分子を用いた OH/π 相互作用の評価

J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 12928-12938.

Selected as Journal Cover

C₆₀ 骨格に隔離した単一水分子をプロ ーブに用いることで,回転挙動の観点か ら OH/π 相互作用を評価し、理論的解釈 を行なった. 温度可変 NMR 測定の結果, 内包水分子のシグナルは低磁場側へシ フトし、低温下では OH/π 相互作用をも



つオレフィン-水錯体の構造特性の寄与が大きくなることがわかった. 緩和時間解析の結果, 内 包水分子は低圧下におけるガス状水分子のように振舞うことがわかり, OH/π 相互作用の強さは 約 0.3 kcal/mol であると見積もられた. 理論計算の結果, 内包された水分子の配向に依存し, ΟΗ/π 結合形成に寄与する主要な相互作用が静電相互作用から軌道相互作用へと切り替わることがわ かった. これは, OH/π 相互作用が静電相互作用に支配されているという通説に対し新たな知見 を与えるものである.

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件(うち査読付論文 10件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件)

1.著者名 Hashikawa Yoshifumi、Yasui Hidefumi、Kurotobi Kei、Murata Yasujiro 2.論文標題 Synthesis and properties of open-cage fullerene C60 derivatives: impact of the extended - 2018年 conjugation 3.雑誌名 Materials Chemistry Frontiers 信.最初と最後の真206~213 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7qm00449d 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」 「国際共著」	
Hashikawa Yoshifumi、Yasui Hidefumi、Kurotobi Kei、Murata Yasujiro 2 2 . 論文標題 Synthesis and properties of open-cage fullerene C60 derivatives: impact of the extended - 2018年 conjugation 3 . 雑誌名 Materials Chemistry Frontiers 「掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7qm00449d オープンアクセス 国際共著	limat
Synthesis and properties of open-cage fullerene C60 derivatives: impact of the extended - 2018年 conjugation 3.雑誌名 Materials Chemistry Frontiers 「掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7qm00449d オープンアクセス 国際共著	limi
Synthesis and properties of open-cage fullerene C60 derivatives: impact of the extended - 2018年 conjugation 3.雑誌名 Materials Chemistry Frontiers 「掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7qm00449d オープンアクセス 国際共著	limit
conjugation 6.最初と最後の頁 3.雑誌名 6.最初と最後の頁 Materials Chemistry Frontiers 206~213 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 10.1039/c7qm00449d 有 オープンアクセス 国際共著	limat
conjugation 6.最初と最後の頁 3.雑誌名 6.最初と最後の頁 Materials Chemistry Frontiers 206~213 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 10.1039/c7qm00449d 有 オープンアクセス 国際共著	Ī
3.雑誌名 6.最初と最後の頁 Materials Chemistry Frontiers 206~213 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 10.1039/c7qm00449d 有 オープンアクセス 国際共著	im
Materials Chemistry Frontiers 206~213 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 10.1039/c7qm00449d 有 オープンアクセス 国際共著	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	
10.1039/c7qm00449d 有 オープンアクセス 国際共著	
10.1039/c7qm00449d 有 オープンアクセス 国際共著	
オープンアクセス 国際共著	
オーノンアクセスではない、又はオーノンアクセスが困難 -	
4 ++/ <i>b</i>	
1 . 著者名 4 . 巻	
Zhu Guo-Zhu、Liu Yuan、Hashikawa Yoshifumi、Zhang Qian-Fan、Murata Yasujiro、Wang Lai-Sheng 9	
2 . 論文標題 5 . 発行年	
Probing the interaction between the encapsulated water molecule and the fullerene cages in 2018年	
H20@C60? and H20@C59N?	
3.雑誌名 6.最初と最後の頁	ī
	*
Chemical Science 5666 ~ 5671	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	
10.1039/C8SC01031E 有	
10.1003/000001001E	
オープンアクセス 国際共著	
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 該当する	
1 . 著者名 4 . 巻	
Hasegawa Shota, Hashikawa Yoshifumi, Kato Tatsuhisa, Murata Yasujiro 57	
nasegawa shota, nashirawa Toshirumi, kato ratsumsa, wurata rasujiro	
2 . 論文標題	
Construction of a Metal-Free Electron Spin System by Encapsulation of an NO Molecule Inside an 2018年	
Open-Cage Fullerene C60 Derivative	
	-
3.雑誌名 6.最初と最後の頁	į
Angewandte Chemie International Edition 12804 ~ 12808	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無	
10.1002/anie.201807823 有	
オープンアクセス 国際共著	
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 -	
<u> </u>	
1	
1 . 著者名 4 . 巻	
1.著者名 Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 4.巻 54	
Hashikawa Yoshifumi, Hasegawa Shota, Murata Yasujiro 54	
Hashikawa Yoshifumi, Hasegawa Shota, Murata Yasujiro 54	
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro542.論文標題5.発行年	
Hashikawa Yoshifumi, Hasegawa Shota, Murata Yasujiro 54	
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 54 2 . 論文標題 A single but hydrogen-bonded water molecule confined in an anisotropic subnanospace 2018年	
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro542.論文標題5.発行年	Į.
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 54 2 . 論文標題 A single but hydrogen-bonded water molecule confined in an anisotropic subnanospace 2018年	Į
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 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 6 . 最初と最後の真	Ī
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 54 2.論文標題 A single but hydrogen-bonded water molecule confined in an anisotropic subnanospace 2018年 3.雑誌名 Chemical Communications 6.最初と最後の真 13686~13689	į
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 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 6 . 最初と最後の真	ī
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 54 2.論文標題 A single but hydrogen-bonded water molecule confined in an anisotropic subnanospace 2018年 3.雑誌名 Chemical Communications 6.最初と最後の真 13686~13689	Ī
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 54 2.論文標題 A single but hydrogen-bonded water molecule confined in an anisotropic subnanospace 2018年 3.雑誌名 Chemical Communications 6.最初と最後の真 13686~13689 掲載論文のDOI(デジタルオプジェクト識別子) 査読の有無 有	in.
Hashikawa Yoshifumi、Hasegawa Shota、Murata Yasujiro 54 2. 論文標題 A single but hydrogen-bonded water molecule confined in an anisotropic subnanospace 2018年 3. 雑誌名 Chemical Communications 6. 最初と最後の頁 13686~13689	

1 . 著者名	4 . 巻
Hashikawa Yoshifumi、Murata Yasujiro	83
2.論文標題 Wavelength-Dependent Efficiency of Sequential Photooxygenation: C=C Bond Cleavage on Open-Cage C6O 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 \$20	1 2
1 . 著者名 Hashikawa Yoshifumi、Murata Yasujiro	4.巻 25
2.論文標題 Probing the Regioselectivity with Encapsulated H2: Diels-Alder Reaction of an Open-Cage C60 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 H2O Encapsulated in C6OAppearing 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.jpclett.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
	T
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	4.巻
Hashikawa Yoshifumi、Murata Yasujiro	141
2.論文標題	5 . 発行年
H2O/Olefinic- Interaction inside a Carbon Nanocage	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)	査読の有無
10.1021/jacs.9b06759	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	4 . 巻
Tsukao Masahiro, Hashikawa Yoshifumi, Toyama Nana, Muraoka Masahiro, Murata Michihisa, Sasamori	7
Takahiro, Wakamiya Atsushi, Murata Yasujiro	
2.論文標題	5 . 発行年
Propeller-Shaped Aluminum Complexes with an Azaperylene Core in the Ligands	2019年
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Inorganics	109 ~ 109
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.3390/inorganics7090109	有
オープンアクセス	国際共著
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	-

〔学会発表〕 計43件(うち招待講演 0件/うち国際学会 7件)

1 . 発表者名

Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata

2 . 発表標題

Molecules inside Fullerenes as Magnetic Probes for the Detection of Specific Intramolecular Interactions

3 . 学会等名

第54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

Hal Suzuki, Motohiro Nakano, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata

2 . 発表標題

Rotational Dynamics of a H2O Molecule Encapsulated in a Fullerene C6O at Low Temperature

3 . 学会等名

第54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 橋川 祥史,村田 理尚,若宮 淳志,村田 靖次郎
2.発表標題 Pd触媒を用いたフラーレン誘導体の位置選択的構造修飾
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 川崎 皓斗,橋川 祥史,若宮 淳志,村田 靖次郎
2. 発表標題 フラーレン金属錯体の合成と内包水分子の動的挙動
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 長谷川 翔大,橋川 祥史,若宮 淳志,村田 靖次郎
2 . 発表標題 開口部に水素結合をもつ水酸化開口フラーレンC60誘導体の合成と物性
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 長 はる菜,藤井 慎太郎,木口 学,橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 内包フラーレンの単分子接合の電気輸送特性
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 橋川 祥史,村田 靖次郎
2.発表標題 フラーレンC60の疎水性内部空間にとりこまれた水分子の動的挙動
3 . 学会等名 統合物質創製化学研究推進機構(IRCCS) 第二回 若手の会
4 . 発表年 2018年
1.発表者名 橋川 祥史,川崎 皓斗,村田 靖次郎
2 . 発表標題 水分子内包C60の9族金属錯体を用いた金属 - 炭素結合の特性評価
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 長谷川 翔大,橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 開口部に水素結合をもつ水酸化開口フラーレンC60誘導体の合成と内包水分子の動的挙動
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 岡本 脩生,橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 Li+イオンを介した開口フラーレンC60誘導体の二量化挙動
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 橋川 祥史,川崎 皓斗,村田 靖次郎
2 . 発表標題 1H NMR緩和時間測定:水分子内包フラーレンを配位子とする9族金属錯体の構造特性評価
3 . 学会等名 第57回 NMR討論会(2018)
4 . 発表年
2018年
1 . 発表者名 長 はる菜,藤井 慎太郎,木口 学,橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 フラーレンの単分子電気伝導度の制御
3 . 学会等名 第12回 分子科学討論会
4.発表年
2018年
1.発表者名 長谷川 翔大,橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 Dynamic Behavior of a Single but Hydrogen-Bonded Water Molecule inside a Hydroxy Open-Cage Fullerene C60 Derivative
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
2010
1.発表者名 橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 H200C60の誘導体化と分子内相互作用の評価
2
3.学会等名 第5回 造形科学若手研究会
4 . 発表年 2040年
2018年

1 . 発表者名 Sheng Zhang, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata
2 . 発表標題 Construction of a C64N Cage Using an Open-Cage Fullerene C60 Derivative
3.学会等名 第5回 造形科学若手研究会
4 . 発表年 2018年
1.発表者名 橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 フラーレンC60の疎水性内部空間にとりこまれた水分子の動的挙動
3 . 学会等名 統合物質創製化学研究推進機構 第4回国内シンポジウム
4. 発表年 2018年
1. 発表者名 鈴木 晴, 中野 元裕, 橋川 祥史, 村田 靖次郎
2 . 発表標題 フラーレンC60内部に取り込まれた水分子の低温における回転運動と核スピン変換
3 . 学会等名 第54回 熱測定討論会
4 . 発表年 2018年
1 . 発表者名 Sheng Zhang, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata
2 . 発表標題 Development of a Novel Cage-Expansion Method from C60 to C65N and C64N Skeletons
3.学会等名 平成30年度化学研究所研究発表会(第118回)
4 . 発表年 2018年

1. 発表者名 Masashi Ozaki, Jiewei Liu, Yukie Katsuki, Taketo Handa, Ryosuke, Nishikubo, Shinya Yakumaru, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata, Takashi Saito, Yuichi Shimakawa, Yoshihiko Kanemitsu, Akinori Saeki, and Atsushi Wakamiya
2. 発表標題 Fabrication of Sn-Based Perovskite Solar Cells Using Solvent-Coordinated SnX2 Complexes as Key Precursors
3.学会等名 IRCCS-JST CREST Joint Symposium(国際学会)
4.発表年 2018年
1.発表者名 Shota Hasegawa, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata
2. 発表標題 Dynamic Behavior of Hydrogen Bonds on a Sulfur-Containing Open-Cage Fullerene C60 Derivative
3.学会等名 The 15th International Symposium on Inorganic Ring Systems (IRIS-15)(国際学会)
4 . 発表年 2018年
1 . 発表者名 Haruna Cho, Shintaro Fujii, Manabu Kiguchi, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata
2. 発表標題 Single-Molecule Charge Transport Properties of Endofullerene
3.学会等名 ICOSS 2018 (国際学会)
4 . 発表年 2018年
1.発表者名 橋川 祥史,村田 靖次郎
2.発表標題 開口フラーレン誘導体へのアントラセン付加反応:内包水素分子を用いた位置選択性の評価

3 . 学会等名

4 . 発表年 2019年

日本化学会 第99春季年会

1. 発表者名 長谷川 翔大,橋川 祥史,加藤 立久,村田 靖次郎
2 . 発表標題 Synthesis and Properties of an Open-Cage Fullerene C60 Derivative Encapsulating a Paramagnetic NO Molecule
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 張 生, 橋川 祥史, 村田 靖次郎
2 . 発表標題 Novel Fullerenes Having C65N and C64N Cages Constructed by Expansion of C60
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 金 揆善,張 生,橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 トリアジン誘導体を用いた水分子内包フラーレンC60の簡便な大量合成法の開発
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 権藤 匠洋,上田 善弘,森崎 一宏,橋川 祥史,村田 靖次郎,川端 猛夫
2 . 発表標題 特異なキラリティを有するラセミ体開口フラーレンの触媒的速度論的光学分割
3 . 学会等名 日本薬学会 第139年会
4 . 発表年 2019年

4 76 + 476
1.発表者名 小嶋 晃平,阿部 竜,小島 広孝,Jung Min-Cherl,辨天 宏明,橋川 祥史,村田 靖次郎,中村 雅一
2.発表標題 水内包フラーレンにおける巨大ゼーベック効果
3.学会等名 第80回 応用物理学会 秋季学術講演会
4 . 発表年
2019年
1.発表者名 杜 少卿,橋川 祥史,村田 靖次郎,平川 一彦
2.発表標題
2. 光な信題 C60フラーレンに閉じ込められた単一水分子の電子誘起分子振動
3.学会等名 第80回 応用物理学会 秋季学術講演会
4.発表年
2019年
1.発表者名 橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 水分子内包C60誘導体を用いた分子内OH/ 相互作用の解析
3.学会等名 第30回 基礎有機化学討論会
4 . 発表年 2019年
1.発表者名
T . 究表有名 岡本 脩生,橋川 祥史,廣瀬 崇至,村田 靖次郎
2. 及羊種語
2 . 発表標題 オレフィン架橋型開口フラーレン2量体の合成とX線構造
3.学会等名
第30回 基礎有機化学討論会
4 . 発表年
2019年

1.発表者名 井手 雄紀,長谷川 翔大,安達 愛結美,橋川 祥史,廣瀬 崇至,村田 靖次郎
2 . 発表標題 過酸化水素およびアセトニトリルを内包した開口フラーレン誘導体の合成
3 . 学会等名 第30回 基礎有機化学討論会
4 . 発表年 2019年
1. 発表者名 木崎 和郎,金 揆善,橋川 祥史,廣瀬 崇至,村田 靖次郎
2 . 発表標題 トリアジン誘導体を用いたH20@C60の大量合成法の開発
3 . 学会等名 第30回 基礎有機化学討論会
4 . 発表年 2019年
1 . 発表者名 Sheng Zhang , Yoshifumi Hashikawa , Takashi Hirose , Yasujiro Murata
2 . 発表標題 Expansion of Fullerene C60 Cage to C65N, C64N and C70N2 Skeletons
3 . 学会等名 第30回 基礎有機化学討論会
4 . 発表年 2019年
1. 発表者名 鈴木 晴, 堀井 洋司, 宮崎 裕司, 中野 元裕, 長谷川 翔大, 橋川 祥史, 村田 靖次郎
2 . 発表標題 NO分子を内包した開口フラーレンの低温熱容量
3 . 学会等名 第55回熱測定討論会
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata
2 . 発表標題 Dynamic Behavior of a Water Molecule Entrapped inside Caged Carbon-Cluster C60 Derivatives
3 . 学会等名 日本化学会 第100春季年会
4 . 発表年 2020年
1 . 発表者名 Sheng Zhang, Yoshifumi Hashikawa, Takashi Hirose, Yasujiro Murata
2 . 発表標題 Cage Expansion from C70 to C75N Skeletons: Synthesis and Purification
3 . 学会等名 日本化学会 第100春季年会
4 . 発表年 2020年
1 . 発表者名 井手 雄紀,長谷川 翔大,安達 愛結美,橋川 祥史,廣瀬 崇至,村田 靖次郎
2 . 発表標題 過酸化水素を内包した開口フラーレンC60誘導体の合成
3 . 学会等名 日本化学会 第100春季年会
4 . 発表年 2020年
1. 発表者名 木崎 和郎,金 揆善,橋川 祥史,廣瀬 崇至,村田 靖次郎
2 . 発表標題 C=CまたはC=N結合を開口部にもつ開口フラーレンC60誘導体の反応性
3 . 学会等名 日本化学会 第100春季年会
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 小山 智永,廣瀬 崇至,橋川 祥史,村田 靖次郎
2 . 発表標題 らせん型 共役分子に連結したピレンダイマーの合成と円偏光発光特性
3 . 学会等名 日本化学会 第100春季年会
4 . 発表年 2020年
1 . 発表者名 Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata
2 . 発表標題 Dynamic Behaviour of H2O inside Functionalized C6O Derivatives
3 . 学会等名 The 18th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-18)(国際学会)
4 . 発表年 2019年
1 . 発表者名 Sheng Zhang, Yoshifumi Hashikawa, Yasujiro Murata
2 . 発表標題 Expansion of a Fullerene C60 Cage to C65N and C64N Skeletons
3 . 学会等名 The 18th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-18)(国際学会)
4 . 発表年 2019年
1 . 発表者名 ShaoQing Du, Yoshifumi Hashikawa, Ikutaro Hamada, Yasujiro Murata, Kazuhiko Hirakawa
2 . 発表標題 Charge Dependent Vibration of a Single Water Molecule Encapsulated in a C60 Fullerene
3 . 学会等名 International Symposium on Hybrid Quantum Systems 2019 (HQS 2019) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1.発表者名

Kazuro Kizaki, Kim Kyusun, Yoshifumi Hashikawa, Takashi, Hirose, Yasujiro Murata

2 . 発表標題

Development of a Method for Large Scale Synthesis of H20@C60 Using a Triazine Derivative

3.学会等名

IRCCS The 3rd Joint International Symposium (国際学会)

4.発表年

2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

_

6 . 研究組織

•	• H/1 / C/MILMAN		
	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