

令和 2 年 6 月 2 日現在

機関番号：14603

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03042

研究課題名(和文)空間を立体的にデザインする新規3次元 共役系化合物の構築

研究課題名(英文) Novel 3-dimensional pi-conjugated compounds designed for creation of unique space

研究代表者

荒谷 直樹 (ARATANI, NAOKI)

奈良先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・准教授

研究者番号：60372562

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,300,000円

研究成果の概要(和文)：多環芳香族炭化水素(PAH)は半導体や発光材料として有用な化合物であり、有機エレクトロニクス材料への応用が期待され近年盛んに研究されている。本研究では、高い蛍光量子収率を有するピレンの特性を活かして、効率的な共役拡張を伴った大環状分子の開発などに挑戦した。環状3-8量体の単離に成功し、特性評価の結果、共役拡張による吸収スペクトルの長波長シフトが確認できた。さらに、それぞれの環サイズに応じて独自の特性を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

比較的大きめの芳香族炭化水素から出発して三次元的な共役化合物を創成する方法論を確立することで、巨大な化合物を一挙に構築できる。デザイン性に優れるボトムアップ法により生み出された化合物群は、スマート社会に役立つ軽くて機能性に優れた電子回路材料の開発に貢献する。

研究成果の概要(英文)：Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are useful as semiconductor and luminescent materials, and have been actively studied in recent years for their application to organic electronics materials. In the present study, we took advantage of the properties of pyrene, which has a high fluorescence quantum yield, to develop macrocyclic molecules with efficient pi-expansion. The cyclic trimer was successfully isolated and characterized, and a red-shift in the absorption spectrum due to pi-expansion was confirmed. In addition, the unique properties of each ring size were clarified.

研究分野：有機合成化学

キーワード：有機化学 複合材料・物性 アセン 有機半導体 ナノグラフェン

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。

## 1. 研究開始当初の背景

導電性高分子に代表される $\pi$ 共役系化合物は、現在のフレキシブル材料の根幹をなす化合物群であり、現代有機合成化学の力量を遺憾なく発揮できるターゲットである。有効な $\pi$ 共役を達成することにより、導電性の向上、吸収や発光特性（電子状態）の制御、レドックス活性の利用など、様々な機能性を生み出すことができる。ベンゼン環が2次元状に縮合した芳香族化合物は、一般に多環芳香族炭化水素(PAH)と呼ばれ、広い共役平面と小さな HOMO-LUMO ギャップを有し、有機半導体材料として盛んに研究されている。PAH 研究分野の隆盛・重要性は、国際的には2010年のグラフェンのノーベル賞、国内でも新学術領域「 $\pi$ 空間」「 $\pi$ 造形」など多くのプロジェクトの存在によって実証されていた。

無限サイズの PAH であるグラフェンは、ゼロバンドギャップをもちキャリア移動度が大きく、機械的強度も強い優れた電子材料であるが、サイズや構造のそろった単一分子として取り扱うためには、ベンゼン環からボトムアップ的に合成する必要がある。研究代表者はこれまでトポロジーを制御しながら「分子性グラフェン」の化学を研究してきた。グラフェンの積み重なりであるグラファイトはリチウムバッテリーの負極材料や半導体材料として優れた性質をもつ。

例えばペリペンタセンはそのシンプルな構造にもかかわらず合成の未達成な化合物であったが、研究代表者はすでに、置換基や置換位置の工夫によって、テトラベンゾペリペンタセンを安定に単離することに成功していた(ACIE, 2015)。結晶中では、天然には存在しない $\beta$ 型グラファイト様の積層構造を示し、世界で初めて $\beta$ 型グラファイトの特性を測定できる可能性があったが、この積層構造は結晶中のみに見られ、溶液中では見られないため、共有結合による面間の固定化ができれば溶液でも薄膜でも物性測定ができると考えた。一方、有機合成化学によるカーボンナノチューブ(CNT)の部分ユニット合成は、多くのグループによってリング構造の構築までが達成されていたが、「壁」をもつ環状構造体の構築には至っていなかった。グラフェンや CNT は構造によって半導体的・金属的性質を示すことが明らかにされており、構造の明確な分子として CNT を合成した際の世界に与えるインパクトは計り知れない。研究代表者はこれまでに CNT のポルフィリン版ともいえる巨大なポルフィリンナノチューブの合成に成功しており(JACS 2010)、巨大環状共役分子の合成に関しては世界で最も技術・経験があり精通している。

## 2. 研究の目的

ベンゼン環からナノグラフェンをボトムアップ的に合成し、本研究では更に進んで、積層や曲面の導入によって3次元立体的に $\pi$ 共役系を組み上げ、これら PAH 構造体を利用し光や電子を操る化学を探究する。すなわちナノグラフェンのトポロジーを制御しながら、グラファイトやナノチューブなどの「分子」の有機化学を研究する。また本研究では分子骨格から視点を移して、 $\pi$ 共役系によって炭素骨格を組み上げることが同時に $\pi$ 共役系に囲まれた「空間」をデザインしていることを意識し、層間あるいは閉じた空間など、壁の内側の空間も利活用する。

チューブ状に関しては例えば、Jasti、伊丹、山子、磯部らによって相次いでシクロパラフェニレン(CPPあるいはカーボンナノリング)の合成が報告されたが、これらは基本的に「線」であり、壁をもたない(注:本研究期間に伊丹らによってカーボンナノベルトン合成が報告されている)。また、CPPは「アームチェア型」CNTの基本ユニットであり、いまだ「zigzag型」CNTの報告例は磯部らの一例のみである(ただしこの例も「線」である)(注:これも伊丹らによってごく最近報告された)。溶解性と安定性を意識しながら「構造が明確である」ことにこだわり、分子として扱うことができるグラフェン・ナノチューブを手に入れるために、慎重に分子設計し平面 $\pi$ 共役系を徐々に大きくしていく。

## 3. 研究の方法

本研究では、PAHに基づく環状多量体を構築する。また、究極的にはzigzag型カーボンナノチューブのボトムアップ合成に挑戦する。これらの化合物の合成はいずれも同時に外部環境と著しく異なる電子に囲まれた孤立した空間の創出にもなる。そのための分子設計指針と合成法を確立し、これまでに全く例のない構造体ライブラリーの構築に挑戦する。高効率の酸化還元特性や優れた半導体特性などをもつ分子性ナノグラフェンやナノチューブを用いた電子材料の開発を目指す。

## 4. 研究成果

## (1) ユニークな構造をもつピレン誘導体の合成と物性

蛍光量子収率の高いピレンは、既に1,3位での環化反応が報告されている(Müllen, Isobeら)。一方で、よりサイズの大きな環状分子を構築するには多段階で手間のかかる合成が必要であり困難であることから、これまで報告が無かった。

研究代表者は、蛍光量子収率の高いピレンの特性を最大限に活かすため、効率的な共役拡張を伴った大環状分子の開発に挑戦した。ここではピレンの1,8位で環状に直接結合することで迅速に環サイズ・共役系が拡張する一連のシクロ[n]ピレニレン(CPn)の合成およびその系統的な物性を報告する。以下に示すように、単結晶X線構造解析を駆使して分子構造を明らかにし、各種光学測定により、環サイズにユニークなCPnの興味深い特徴を明らかにした。

P1BにNi(cod)<sub>2</sub>を用いた山本カップリングを適用したところ、環状ピレン多量体CPnの生成を確認し、環状オリゴマーのみが得られていることを高分解能質量分析によって19量体まで確認した。我々の知る限り、同一分子が環状に直接結合したシクロアリーレンの中では最も大きい分子が得られている。このうち3量体から8量体までの単離に成功した(Scheme 1)。

CP3、CP4、CP6、CP8の<sup>1</sup>H NMRでは、芳香族領域はシングレットピーク1本、ダブルットピーク2本の全てのピレンが溶媒中で等価な構造であることが明らかとなった。一方で、CP5およびCP7の場合では、シングレットピーク1本と多数のダブルットピークから成り、溶媒中で対称性が下がっており各ピレンが非等価な構造であることがわかった。次に、塩化メチレン中のCPnおよびその単量体であるP1の紫外可視吸収スペクトルおよび蛍光スペクトル(Figure 1)を以下に示す。吸収および蛍光ともに、全てのCPnはP1より長波長シフトした。4量体以上のCPnは290 nm付近と370 nm付近に吸収を持っているが、CP3は550 nm付近にまで吸収が確認される。また、蛍光スペクトルでも同様に、CP3が他の環状多量体よりも長波長シフトし、オレンジ色の発光を示した。4量体以上のCPnは青色発光を有している。

CP3は吸収蛍光ともに、これまでに合成されたピレンに基づくいずれの多量体よりも長波長シフトを示した。その原因を明らかにするため単結晶X線構造解析によって固体構造を確認し、非常に歪んだ構造であることを明らかにした(Figure 2)。

Figure 2aに示すpyrene 1とpyrene 3はねじれ角が19.5度と非常に小さく、共平面になっている。立体的な規制から、長軸方向はピレン環が正の方向に歪んでいる。本来平面であれば0となるPOAV(π-orbital axis vector)値が、炭素C1とC54では4.88度、4.04度であった。一般的に知られている高歪み化合物のPOAV値と比較すると、[8]CPPと同程度の歪みである。さらに、C13とC56の距離は2.88 Åとファンデルワールス半径の和よりも著しく短く、その炭素同士の立体反発によりピレンは短軸方向に負の歪みをもつ。その結果、C1とC54の結合距離は、通常のC(sp<sup>2</sup>)-C(sp<sup>2</sup>)結合(av. 1.49 Å)よりも非常に長い1.546(5) Åにまで伸びていることが確認された。また、CP3の歪みエネルギーは60.0 kcal/molであった。

さらに、この歪みエネルギーを駆動力としてCP3に酸素原子が挿入し、CP30へ変換することを明らかにした。金属触媒を用いない酸素の挿入反応は、ビアリールの炭素-炭素結合間に直接酸素が導入される反応として初めてである。塩化メチレン中、室温、室内光下で599 nmのCP3の蛍光ピークは480 nmの新たなピークに徐々に変化する。本反応により得られたCP30は、単結晶X線構造解析により2つのピレン間に酸素原子が挿入し環状エーテルになっていることを確認した。原子間距離やねじれ角から、酸素が挿入することによって歪みが解消されたことが分かる。ピレン間への酸素の挿入反応は、CP3が励起三重項状態から基底状態に下がる際に酸素が一重項になっていると考えられ、DFT計算により反応機構を提案した。

さらに、硫化ナトリウム・9水和物により、硫黄原子が挿入した環状チオエーテルCP3Sへ変換することにも成功した。ジアリールスルフィドおよびスルホンのSの脱離によるビアリール化合物への変換が開発されているため、ビアリールチオエーテルの合成は貴重な炭素-炭素結合活性化プロセスである。

CP5の構造を知るためメトキシ置換したCP5を計算によって構造最適化したところ、環状にらせんを巻いていることが明らかとなった。中心のピレンから左回りにR, S, R, S, Rの立体配座を示すものと、S, R, S, R, Sの立体配座を示すものの2つの鏡像体が得られた(Figure 3)。隣り合うピレン同士の10,10'位、つまりペリ位の水素による立体反発によって、キラル構造を保持していることが示唆される。環状骨格自体がキラルな分子は、2つのアントラセンのねじれの向きによるキラリティーをもつアントラセン4量体やシクロクリセニレンが報告されている。また、ピナフチルの軸不斉を利用した、ナフタレンの大環状分子も最近報告された。本研究で得られたシクロ[5]ピレニレンは、ピレンの数が奇数であることによって環全体にキラリティーを発生する珍しい系である。

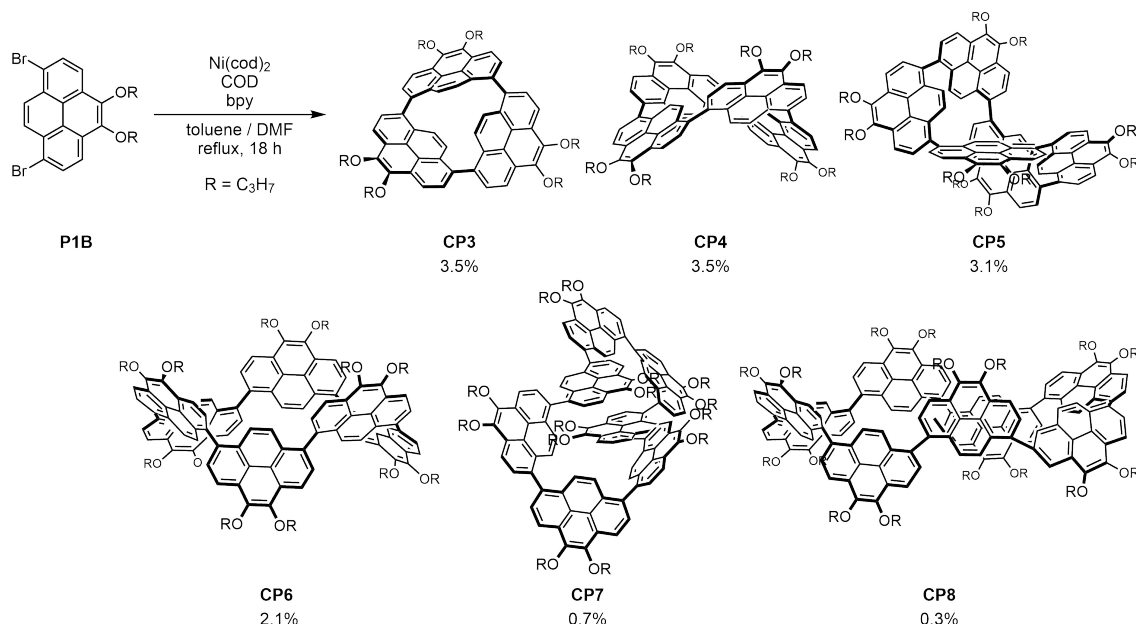
キラルカラムを用いた光学分割を様々な条件で検討した結果、ヘキサノール/2-プロパノール = 99.8 : 0.2の展開溶媒を用いることにより、2つの光学異性体に分離することに成功した。光学分割したCP5の円二色性(CD)スペクトルおよび円偏光発光(CPL)スペクトルを測定したところ、上下対称のシグナルが観測されたことから、それらが鏡像異性体であることが確認できた。また、CPLのg-factorは0.001という結果が得られた。CP5のラセミ化速度はCDスペクトルの減少から2.5 × 10<sup>-4</sup>/s、半減期が0.4時間、活性化エネルギーは22 kcal/molと見積もられた。この活性化エネルギーは、1,1'-ピナフチルのラセミ化と同程度のエネルギーである。ラセミ化できるということは適切なゲスト分子によって片方のエネンチオマーに寄せられる可能性があり、現在検討を進めている。

## (2) 分子性カーボンナノベルトの合成ルート探索

帯状の炭素シートの端同士を縮環するとチューブ型になる。ベンゼン環には向きがあるため、チューブ構造の性質はその向きに大きく依存する。そこで、前駆体の構造を工夫してzigzag

型の環状ナノベルトを作り、電子的性質を探索する。zigzag 型カーボンナノチューブのボトムアップ合成はこれまでに例がない。一般的に zigzag 構造は edge 部分にスピが残るため不安定であるが、縦方向にベンゼン環を導入してシクラセン共役系を回避し、安定性を確保する。バルクの zigzag 型カーボンナノチューブは 3分の1が金属的性質、3分の2が半導体的性質をもつが、分子性カーボンナノベルトの創成によりこれらを完全に作り分けることができる。これは分子レベルの構造としては依然として完全に制御できていないカーボンナノチューブを、有機合成化学的にボトムアップ手法で合成することにもつながる。

ピレンの反応性を利用して環状化合物 C3 を単離することに成功した (Scheme 2)。単結晶エックス線構造解析にも成功している。今後、酸化や脱塩化水素反応によって共役系を完成させる。曲面状の化合物を戦略的に合成するには、どの段階でどの反応で環状化して芳香族化するか極めて重要である。ハロゲン化物およびホウ素化物を組み合わせ、研究代表者が得意とする鈴木-宮浦クロスカップリングを段階的に利用しながら単結合リング状分子を合成し、最後に「ベルト化」する縮環反応条件を探索する。



Scheme 1. Synthesis of cyclic pyrene oligomers.

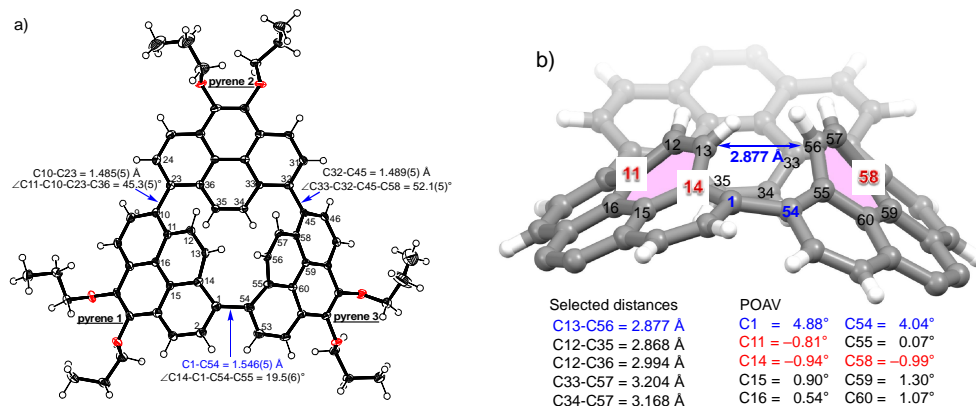
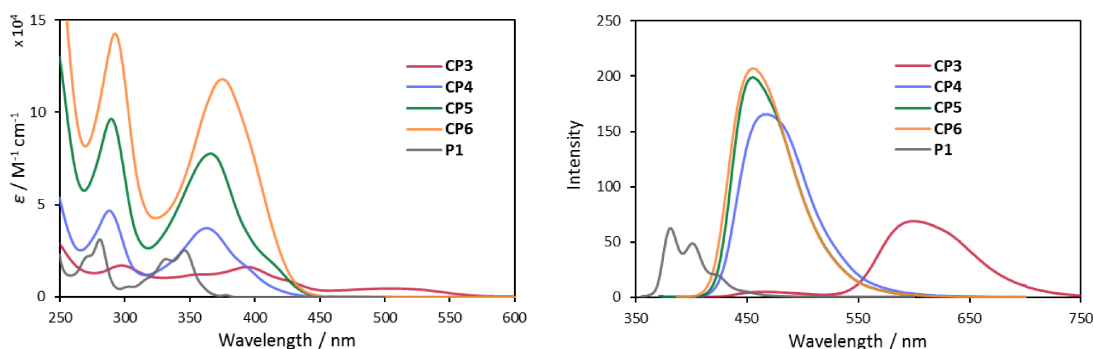


Figure 2.

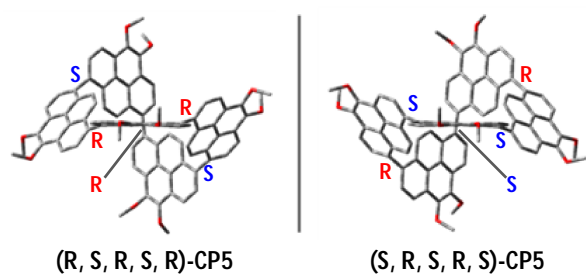
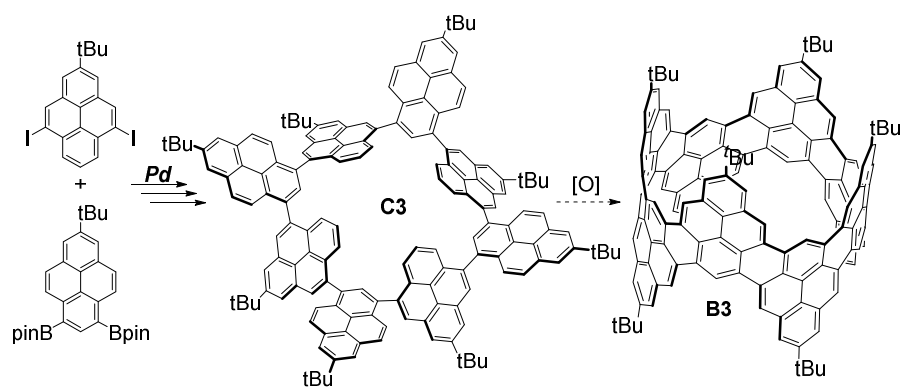


Figure 3.



Scheme 2

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計27件（うち査読付論文 27件 / うち国際共著 7件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Xue Songlin, Kuzuhara Daiki, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 21
2. 論文標題 Synthesis of a Porphyrin(2.1.2.1) Nanobelt and Its Ability To Bind Fullerene	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 2069 ~ 2072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.9b00329	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 Kurosaki Ryo, Hayashi Hironobu, Suzuki Mitsuharu, Jiang Julong, Hatanaka Miho, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 10
2. 論文標題 A remarkably strained cyclopyrenylene trimer that undergoes metal-free direct oxygen insertion into the biaryl C-C $\sigma$ -bond	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 6785 ~ 6790
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9SC01777A	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 Xue Songlin, Kuzuhara Daiki, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 58
2. 論文標題 Control of Aromaticity and cis / trans Isomeric Structure of Non Planar Hexaphyrin(2.1.2.1.2.1) and Metal Complexes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 12524 ~ 12528
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201906946	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 Yamauchi Mitsuaki, Yokoyama Kosuke, Aratani Naoki, Yamada Hiroko, Masuo Sadahiro	4. 巻 58
2. 論文標題 Crystallization Induced Emission of Azobenzene Derivatives	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 14173 ~ 14178
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201908121	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 Kuzuhara Daiki, Nakaoka Haruka, Matsuo Kyohei, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 23
2. 論文標題 2,7,12,17-Tetra(2,5-thienylene)-substituted porphycenes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Porphyrins and Phthalocyanines	6. 最初と最後の頁 898 ~ 907
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S1088424619500743	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 Kurosaki Ryo, Suzuki Mitsuharu, Hayashi Hironobu, Fujiki Michiya, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 55
2. 論文標題 Torsional chirality generation based on cyclic oligomers constructed from an odd number of pyrenes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 9618 ~ 9621
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CC03123E	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 Hayashi Hironobu, Kato Yuki, Matsumoto Akinobu, Shikita So, Aizawa Naoya, Suzuki Mitsuharu, Aratani Naoki, Yasuda Takuma, Yamada Hiroko	4. 巻 25
2. 論文標題 Synthesis of Anthracene Derivatives with Azaacene Containing Iptycene Wings and the Utilization as a Dopant for Solution Processed Organic Light Emitting Diodes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 15565 ~ 15571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201903476	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 Jeong Eunjeong, Takahashi Kohtaro, Rajagopal Shinaj K., Koganezawa Tomoyuki, Hayashi Hironobu, Aratani Naoki, Suzuki Mitsuharu, Nguyen Thuc-Quyen, Yamada Hiroko	4. 巻 85
2. 論文標題 Orbital-Energy Modulation of Tetrabenzoporphyrin-Derived Non-Fullerene Acceptors for Improved Open-Circuit Voltage in Organic Solar Cells	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 168 ~ 178
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.9b02386	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 Suzuki Mitsuharu, Terai Kengo, Quinton Cassandre, Hayashi Hironobu, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 11
2. 論文標題 Open-circuit-voltage shift of over 0.5 V in organic photovoltaic cells induced by a minor structural difference in alkyl substituents	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 1825 ~ 1831
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc04956h	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 Kuzuhara Daiki, Furukawa Wataru, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 24
2. 論文標題 Cyclic butadiyne-linked porphyrin(2.1.2.1) oligomers	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Porphyrins and Phthalocyanines	6. 最初と最後の頁 489 ~ 497
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S1088424619501931	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 Kano Haruka, Uehara Keiji, Matsuo Kyohei, Hayashi Hironobu, Yamada Hiroko, Aratani Naoki	4. 巻 16
2. 論文標題 Direct borylation of terylene and quaterylene	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Beilstein Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 621 ~ 627
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3762/bjoc.16.58	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 Kuzuhara Daiki, Kawatsu Shinsuke, Furukawa Wataru, Hayashi Hironobu, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 2018
2. 論文標題 Synthesis of [14]Oxatriphyrins(2.1.1) and Their Transformation into Ethane-Bridged Oxatriphyrins by Boron Complexation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 European Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 2122 ~ 2129
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejoc.201800309	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 Mei Peifeng, Matsumoto Akinobu, Hayashi Hironobu, Suzuki Mitsuharu, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 8
2. 論文標題 1,3-Phenylene-bridged naphthalene wheels synthesized by one-pot Suzuki-Miyaura coupling and the complex of the hexamer with C60	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 20872 ~ 20876
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8ra03601b	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 Liu Chunchen, Sandoval-Salinas Maria Eugenia, Hong Yongseok, Gopalakrishna Tullimilli Y., Phan Hoa, Aratani Naoki, Heng Tun Seng, Ding Jun, Yamada Hiroko, Kim Dongho, Casanova David, Wu Jishan	4. 巻 4
2. 論文標題 Macrocyclic Polyradicaloids with Unusual Super-ring Structure and Global Aromaticity	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem	6. 最初と最後の頁 1586 ~ 1595
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chempr.2018.03.020	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 Xue Songlin, Kuzuhara Daiki, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 57
2. 論文標題 [30]Hexaphyrin(2.1.2.1.2.1) as Aromatic Planar Ligand and Its Trinuclear Rhodium(I) Complex	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 9902 ~ 9906
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b00977	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 Uehara Keiji, Mei Peifeng, Murayama Tomohisa, Tani Fumito, Hayashi Hironobu, Suzuki Mitsuharu, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 2018
2. 論文標題 An Anomalous Antiaromaticity That Arises from the Cycloheptatrienyl Anion Equivalent	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 European Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 4508 ~ 4511
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejoc.201800769	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 Uehara Keiji, Mei Peifeng, Murayama Tomohisa, Tani Fumito, Hayashi Hironobu, Suzuki Mitsuharu, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 2019
2. 論文標題 Response to "The Seven-Membered Ring in Bis-Azuleno-Naphthalene is Non-Aromatic"	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 European Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 860 ~ 861
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejoc.201801766	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 Chen Wangqiao, Li Xinxiang, Long Guankui, Li Yongxin, Ganguly Rakesh, Zhang Mingtao, Aratani Naoki, Yamada Hiroko, Liu Ming, Zhang Qichun	4. 巻 57
2. 論文標題 Pyrene-Containing Twistarene: Twelve Benzene Rings Fused in a Row	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 13555 ~ 13559
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201808779	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 Kawano Koki, Hayashi Hironobu, Yoshimoto Shinya, Aratani Naoki, Suzuki Mitsuharu, Yoshinobu Jun, Yamada Hiroko	4. 巻 24
2. 論文標題 An Ethynylene-Bridged Pentacene Dimer: Two-Step Synthesis and Charge-Transport Properties	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 14916 ~ 14920
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201803002	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 Xie Dagan, Liu Yang, Rao Yutao, Kim Gakhyun, Zhou Mingbo, Yu Donghai, Xu Ling, Yin Bangshao, Liu Shubin, Tanaka Takayuki, Aratani Naoki, Osuka Atsuhiko, Liu Qingyun, Kim Dongho, Song Jianxin	4. 巻 140
2. 論文標題 meso-Triaryl-Substituted Smaragdyrins: Facile Aromaticity Switching	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 16553 ~ 16559
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.8b07973	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 Xue Songlin, Kuzuhara Daiki, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 21
2. 論文標題 Synthesis of a Porphyrin(2.1.2.1) Nanobelt and Its Ability To Bind Fullerene	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 2069 ~ 2072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.9b00329	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 Takahashi Kohtaro, Kumagai Daichi, Yamada Naoya, Kuzuhara Daiki, Yamaguchi Yuji, Aratani Naoki, Koganezawa Tomoyuki, Koshika Sota, Yoshimoto Noriyuki, Masuo Sadahiro, Suzuki Mitsuharu, Nakayama Ken-ichi, Yamada Hiroko	4. 巻 5
2. 論文標題 Side-chain engineering in a thermal precursor approach for efficient photocurrent generation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 14003 ~ 14011
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7ta04162d	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 Gu Pei-Yang, Liu Guangfeng, Zhao Jun, Aratani Naoki, Ye Xin, Liu Yang, Yamada Hiroko, Nie Lina, Zhang Huanxiang, Zhu Jia, Li Dong-Sheng, Zhang Qichun	4. 巻 5
2. 論文標題 Understanding the structure-determining solid fluorescence of an azaacene derivative	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 8869 ~ 8874
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7tc03089d	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 Zhang Senmiao, Oh Kim Jun, Li Yajie, Bin Wen Bin Wen, Zhou Mingbo, Liu Shubin, Aratani Naoki, Xu Ling, Kim Dongho, Song Jianxin	4. 巻 53
2. 論文標題 meso-to-meso 2,5-Pyrrolylene bridged zig-zag porphyrin arrays	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chem. Commun.	6. 最初と最後の頁 11488 ~ 11491
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7cc06793c	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 Yamashita Masataka, Kawano Koki, Matsumoto Akinobu, Aratani Naoki, Hayashi Hironobu, Suzuki Mitsuharu, Zhang Lei, Briseno Alejandro L., Yamada Hiroko	4. 巻 23
2. 論文標題 Dinaphthotetrathiafulvalene Bisimides: A New Member of the Family of -Extended TTF Stable p-Type Semiconductors	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 15002 ~ 15007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201702657	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 Tamoto Akira, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 23
2. 論文標題 Contraction of -Conjugated Rings upon Oxidation from Cyclooctatetraene to Benzene via the Tropylium Cation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 16388 ~ 16392
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201704008	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 Tamoto Akira, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 358
2. 論文標題 Photophysical properties and structural analysis of modified methylene blues as near infrared dyes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry	6. 最初と最後の頁 441 ~ 446
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jphotochem.2017.10.031	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34件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 川村真由・林宏暢・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 エッジ修飾グラフェンナノリボン作製を目指した前駆体合成
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 黒崎澗・畑中美穂・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 高歪み[3]シクロ-1,8-ピレニレンの合成と炭素-炭素結合開裂反応
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 荒谷直樹
2. 発表標題 ユニークな構造をもつ 拡張ピレンの合成と物性
3. 学会等名 第13回有機 電子系シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 加納春華・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 C70への二重付加反応によるキラルフラレーンの創製
3. 学会等名 第13回有機 電子系シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 荒谷直樹
2. 発表標題 ユニークな構造をもつピレン誘導体の合成と物性
3. 学会等名 日本学術振興会 情報科学用有機材料第142委員会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 黒崎 澗・山田 容子・荒谷 直樹
2. 発表標題 2つのナノ空間をもつ環状ピレン多量体による分子認識
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 加納春華・藤木道也・山田容子・荒谷直樹
2. 発表標題 C70 への二重付加反応によるキラルフラレンの合成と光物性
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 荒谷 直樹・上原 慧士・松尾 恭平・山田 容子
2. 発表標題 アズレン置換オリゴリレンの合成と物性
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 森本 裕詞・松尾 恭平・山田 容子・荒谷 直樹
2. 発表標題 拡張フェロセンの合成
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 伊東 俊昭・荒谷 直樹・山田 容子
2. 発表標題 近赤外蛍光を指向した 共役拡張ローダミンの合成と物性
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 Peifeng Mei, Naoki Aratani, and Hiroko Yamada
2. 発表標題 Facile Synthesis of Cyclic $\pi$ -Conjugated Compounds by Suzuki-Miyaura Cross Coupling Reaction
3. 学会等名 ISNA18 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ryo Kurosaki, Naoki Aratani, Hiroko Yamada
2. 発表標題 Structure-based Unique Properties of Cyclo-1,8-pyrenylenes
3. 学会等名 ISNA18 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊藤 達哉, 鈴木 充朗, Jeong Eunjeong, 小金澤 智之, 荒谷 直樹, 山田 容子
2. 発表標題 5,15-置換テトラベンゾポルフィリン誘導体の薄膜においてアルキル鎖長が分子配列および電荷キャリア輸送特性に与える影響
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 ジョン ウンジョン, 鈴木 充朗, 荒谷 直樹, 山田 容子
2. 発表標題 熱前駆体法で成膜したテトラベンゾポルフィリン誘導体をアクセプター材料とするバルクヘテロジャンクション型有機太陽電池
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 村上 裕也・林 宏暢・荒谷 直樹・山田 容子
2. 発表標題 ジケトンとジアミンによる脱水縮合反応を用いた環状分子合成手法の開拓
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 戸田 夏木・松尾 恭平・荒谷 直樹・山田容子
2. 発表標題 ピリリウム環を組み込んだ縮合多環式芳香族化合物の合成と物性
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 Naoki Aratani, Keiji Uehara, Peifeng Mei, Kohtaro Takahashi, Mitsuharu Suzuki, and Hiroko Yamada
2. 発表標題 Benzoporphyrin-conjugated Dyes with Near-Infrared Absorption
3. 学会等名 10TH INTERNATIONAL CONFERENCE on PORPHYRINS & PHTHALOCYANINES (ICPP 10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年



1. 発表者名 上原慧士・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 特異な電子状態をもつ縮環アズレンの合成
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 Peifeng Mei, Naoki Aratani, Hiroko Yamada
2. 発表標題 Synthesis and Photophysical Properties of Fused Pyrene Oligomers
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 Naoki Aratani, Erika Ikeda, Hiroko Yamada
2. 発表標題 N-doped Nano-graphenes
3. 学会等名 Japan-UK Symposium on 3D Active-site Science in London (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 上原 慧士・荒谷 直樹・山田 容子
2. 発表標題 ナフタレン縮環アズレンの合成と物性
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 佐藤 静香、林 宏暢、荒谷 直樹、山田 容子
2. 発表標題 屈曲した前駆体構造を利用した 環状化合物の合成
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 黒崎 澗・荒谷 直樹・山田 容子
2. 発表標題 キラル環状ピレン5量体の合成および光学特性
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 荒谷直樹
2. 発表標題 From Nanographenes to Molecular Graphites
3. 学会等名 INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON PURE & APPLIED CHEMISTRY (ISPAC 2017) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Peifeng Mei, Naoki Aratani, and Hiroko Yamada
2. 発表標題 Facile Synthesis of Cyclic $\pi$ -Conjugated Compounds by Suzuki-Miyaura Cross Coupling Reaction
3. 学会等名 第15 回ホスト-ゲスト・超分子化学シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 A. Tamoto, N. Aratani, H. Yamada
2. 発表標題 From cyclooctatetraene to benzene ring by the oxidative rearrangement
3. 学会等名 the 17th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-17) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Peifeng Mei, Akinobu Matsumoto, Naoki Aratani, and Hiroko Yamada
2. 発表標題 Facile Synthesis of Cyclic $\pi$ -Conjugated Compounds by Suzuki-Miyaura Cross Coupling Reaction
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 田中智士・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 5,7,12,14-四置換ペンタセンの合成と性質
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 池田枝里佳・松本彬伸・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 含窒素ナノグラフェンの合成と物性
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 松本 彬伸・Holger Bettinger・荒谷 直樹・山田 容子
2. 発表標題 BN置換ピレンの合成とその物性
3. 学会等名 日本化学会春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 朝付幸史朗、荒谷直樹、山田容子
2. 発表標題 共役拡張コラニューレンの合成
3. 学会等名 日本化学会春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 上原慧士、荒谷直樹、山田容子
2. 発表標題 コロネンを用いた二層グラフェンモデルの合成と物性
3. 学会等名 日本化学会春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中智士・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 5,7,12,14-テトラエチニルペンタセンおよびその多量体の合成と物性
3. 学会等名 日本化学会春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 葛原大軌・薛松林・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 ヘキサフィリン(2.1.2.1.2.1)金属錯体の合成
3. 学会等名 日本化学会春季年会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

有機光分子科学研究室 <a href="http://mswebs.naist.jp/LABs/env_photo_greenmat/">http://mswebs.naist.jp/LABs/env_photo_greenmat/</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