

令和 2 年 6 月 18 日現在

機関番号：72101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05797

研究課題名(和文) 金属内包フラーレンの化学修飾による機能開拓

研究課題名(英文) Creation of functionalized endohedral metallofullerenes and its function

研究代表者

赤坂 健 (Akasaka, Takeshi)

公益財団法人国際科学振興財団・その他部局等・主席研究員

研究者番号：60089810

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：次世代を切り拓く革新的な電子・光・磁気機能を有する物質の創出を図るため、分子エレクトロニクス素子や単一分子デバイスをはじめ、磁氣的、光学的機能材料としてのナノカーボンが注目され、その基礎および応用研究が精力的に展開されている。本研究では、最も特異な構造と電子的特性を有するナノカーボンの一つである金属内包フラーレンに着目し、元素化学に基づく選択的化学修飾による構造、電子的特性、さらには磁性の制御を行った。さらに、得られた金属内包フラーレン誘導体の集積化を試み、革新的バルク機能を有する新たなナノカーボン材料の創製とその機能開拓を目指した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、次世代を切り拓く革新的な電子・光・磁気機能を有する物質の創出を図るため、分子エレクトロニクス素子や単一分子デバイスをはじめ、磁氣的、光学的機能材料としてのナノカーボンが注目され、その基礎および応用研究が精力的に展開されている。本研究では、最も特異な構造と電子的特性を有するナノカーボンの一つである金属内包フラーレンに着目し、元素化学に基づく選択的化学修飾による構造、電子的特性、さらには磁性の制御を行った。金属内包フラーレンの新規ナノカーボン材料科学への応用に対する重要な足掛かりを得、その結果、革新的機能を有する材料の創製が期待される。

研究成果の概要(英文)：Chemical research into the synthesis, characterization, and functionalization of compounds with π -electron systems, as typified by fullerenes and endofullerenes, is showing steady progress, and the momentum of this area is rising on new evolution. Through the investigation on the reactive nanocarbons, we focused on the unique characteristics of endohedral metallofullerenes that give functionalized molecules with a diverse range of structural and functional variations, when we attempt to construct highly elaborated π -systems with more sophisticated and complex orders and functionality.

研究分野：有機化学

キーワード：フラーレン 金属内包フラーレン 化学修飾 ナノカーボン 常磁性金属内包フラーレン 反磁性金属内包フラーレン

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

フラーレン類は、多様な電子・光学機能をもたらす電子を分子骨格にもつナノサイズの巨大電子系である。その内部空間に金属原子、希ガス原子、窒素原子やクラスターを内包したフラーレンが注目されているが、その中で最も興味深いのが金属原子を内包したフラーレンである。金属内包フラーレンは、内包金属からフラーレンケージへの分子内電子移動により空フラーレンとは異なる新規な電子的特性を示す。La@C₈₂の例を図1に示す。分子内電子移動の結果、金属内包フラーレンは空フラーレンに比べ非常に優れた電子受容性および供与性を併せ持つ。また、申請者らはLa@C₈₂に代表される常磁性の金属内包フラーレンは空気中でも取り扱うことが可能なほど安定な中性ラジカルであり、酸化還元によって反磁性化や常磁性化を容易に制御可能な大変興味深い化合物であることを明らかにした。最近、フラーレンをアクセプターとした光誘起電子移動およびエネルギー移動を示す複合系が数多く合成されており、人工光合成の反応中心や光電変換分子デバイスのモデルなど、機能性材料を指向した応用展開が盛んに行われている。これに対し、より優れた電氣的・磁氣的特性を有する金属内包フラーレンを用いた場合、新たな機能の発現が期待されるが、金属内包フラーレンを鍵物質とした複合系の開発はいまだ未開拓であった。その理由として金属内包フラーレンの取り扱える量が少なかったことが挙げられる。申請者らは金属内包フラーレンが有する高い電子受容能を利用した簡便大量分離法の開発を行った(*Chem. Mater.*, 2004.; *J. Phys. Chem. B* 2006.)。この方法によって金属内包フラーレンを大量に供することが可能になり応用展開が現実のものとなった。金属内包フラーレンの機能化の第一歩として、既に申請者らは位置選択的な金属内包フラーレンの修飾化が可能であるということを見出しつつあり、得られた付加体に対しては単結晶X線結晶構造解析による構造解析にも成功している。今後適切な官能基を思い通りに付加させることができれば、金属内包フラーレンの新規ナノカーボン材料科学への応用に対する重要な足掛かりになると考えられ、その結果、革新的機能を有する材料の創製が期待されている。

2. 研究の目的

近年、次世代を切り拓く革新的な電子・光・磁気機能を有する物質の創出を図るため、分子エレクトロニクス素子や単一分子デバイスをはじめ、磁氣的、光学的機能材料としてのナノカーボンが注目され、その基礎および応用研究が精力的に展開されている。本研究では、最も特異な構造と電子的特性を有するナノカーボンの一つである金属内包フラーレンに着目し、元素化学に基づく選択的修飾による構造、電子的特性、さらには磁性の制御を行う。さらに、得られた金属内包フラーレン誘導体の集積化を試み、革新的バルク機能を有する新たなナノカーボン材料の創製とその機能開拓を目的とした。

3. 研究の方法

本研究では、大量合成した金属内包フラーレンを用いて、電子的特性や反応性の解明を行うと共に元素化学に基づく化学修飾による種々の誘導体合成を行う。さらに集積化による導電性の向上等の機能開拓を行う。具体的には以下の3点に注力した。

1. 反磁性金属内包フラーレンの化学修飾による常磁性金属内包フラーレンの創製
2. 金属内包フラーレンの修飾化による誘導体合成と集積化
3. 集積化常磁性金属内包フラーレンの物性解明と機能化

4. 研究成果

1. 反磁性金属内包フラーレンの化学修飾による常磁性金属内包フラーレンの創製

反磁性金属内包フラーレンのラジカル付加を検討し、得られる常磁性誘導体の電子的特性やさらなる反応性を解明し、新たなラジカル分子の創製とその機能開拓を試みた。具体的には、La₂@C₈₀等の反磁性金属内包フラーレンの一電子還元体は、電子が内包種に局在化し、安定なラジカル種を生成することが理論予測されている。ラジカル付加反応を利用し、新しい安定ラジカル種の合成にチャレンジした。具体的には、ラジカル付加によりスピンの閉じ込められた常磁性金属内包フラーレンの創製が期待される。反磁性金属内包フラーレンのラジカル付加を検討した。得られる常磁性誘導体の電子的特性やさらなる反応性を解明し、新たなラジカル分子の創製とその機能開拓を試みた。具体的には、La₂@C₈₀等の反磁性金属内包フラーレンの一電子還元体は、電子が2個の内包金属原子種に局在化し、安定なラジカル種を生成することが理論予測されている。反応系内で発生させたラジカル付加反応を利用し、フラーレンケージ上に単結合を有する誘導体の生成による新しい安定ラジカル種の合成にチャレンジした。すなわち、スピンのケージ内の2個La原子上に局在化した安定なラジカルとして単離および結晶化を検討

した。

2. 金属内包フラーレンの修飾化による誘導体合成と集積化

金属内包フラーレンの1,3-双極子環化付加、カルベン付加やケイ素化、ゲルミル化反応などによる化学修飾を検討した。さらに、高反応性のmissing metallofullerenesのフェニル化による安定化・単離を試みた。

また、空フラーレンと金属内包フラーレンの個々の電子的特性により反応性が制御されることをC84とSc₂C₂@C84を用いて初めて見出した。また、Sc₃N@C80の選択的一および二付加反応を用いて金属内包フラーレンの構造および電子的特性の制御を解明した。

得られた金属内包フラーレン誘導体のナノロッドおよび薄膜の作成を行った。最近申請者らは常磁性La@C₈₂アダマンタン付加体のナノロッド合成に成功し、置換基導入が常磁性内包フラーレンの規則正しい集積化に効果があることを明らかにしている (*J. Am. Chem. Soc.* 2008, 2011)。合成した種々の金属内包フラーレン誘導体のナノロッドおよび誘導体の自己集積を利用した薄膜の作製を検討した。さらに、常磁性内包フラーレン誘導体のナノロッドおよび薄膜の作成を試みた。最近幾つかの常磁性金属内包フラーレン誘導体においてナノサイズの針状結晶 (ナノロッド) を得ることに成功しているが、集積化金属内包フラーレンの機能評価として、ナノロッドによる導電性測定を試みた。すなわち常磁性金属内包フラーレンナノロッドおよび薄膜に対して導電特性や磁気特性を系統的に調べ、組織体全体に及ぶ電子的・磁気的な性質を明らかにすることに挑戦した。La@C82付加体ナノロッドの温度可変導電性測定により、電気伝導はelectron-hopping model ではなくelectronic band-conduction modelに従うことを明らかにした。

3. 集積化常磁性金属内包フラーレンの物性解明と機能化

集積化金属内包フラーレンの物性を、導電性や固体 EPR および磁化率測定により評価することを試みた。申請者らのごく最近の予備的実験により常磁性金属内包フラーレン誘導体の単結晶の電子移動度はアモルファスシリコンのそれを超える値を有することを明らかにしている。分子配列による導電性発現機構を明らかにした。さらに伝導特性や磁気特性を系統的に調べ、集積体全体に及ぶ電子的、磁気的な性質を、常磁性金属内包フラーレン同士の「分子間相互作用」をキーワードとして明らかにした。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計30件（うち査読付論文 30件 / うち国際共著 27件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Pan Changwang, Shen Wangqiang, Yang Le, Bao Lipiao, Wei Zhan, Jin Peng, Fang Hongyun, Xie Yunpeng, Akasaka Takeshi, Lu Xing	4. 巻 10
2. 論文標題 Crystallographic characterization of Y ₂ C _{2n} (2n = 82, 88, 94): direct Y-Y bonding and cage-dependent cluster evolution	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 4707 ~ 4713
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc00941h	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 Shen Wangqiang, Bao Lipiao, Hu Shuaifeng, Yang Le, Jin Peng, Xie Yunpeng, Akasaka Takeshi, Lu Xing	4. 巻 10
2. 論文標題 Crystallographic characterization of Lu ₂ C _{2n} (2n = 76-90): cluster selection by cage size	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 829 ~ 836
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8sc03886d	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 Hu Shuaifeng, Shen Wangqiang, Yang Le, Duan Guangxiong, Jin Peng, Xie Yunpeng, Akasaka Takeshi, Lu Xing	4. 巻 25
2. 論文標題 Crystallographic and Theoretical Investigations of Er ₂ @C _{2n} (2n = 82, 84, 86): Indication of Distance Dependent Metal-Metal Bonding Nature	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 11538 ~ 11544
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201902321	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 Hu Shuaifeng, Liu Tong, Shen Wangqiang, Slanina Zdenek, Akasaka Takeshi, Xie Yunpeng, Uhlik Filip, Huang Wenhuan, Lu Xing	4. 巻 58
2. 論文標題 Isolation and Structural Characterization of Er@C _{2v} (9)-C ₈₂ and Er@Cs(6)-C ₈₂ : Regioselective Dimerization of a Pristine Endohedral Metallofullerene Induced by Cage Symmetry	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 2177 ~ 2182
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b03313	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 Bao Lipiao, Wang Bingzhe, Yu Pengyuan, Huang Chenli, Pan Changwang, Fang Hongyun, Akasaka Takeshi, Guldi Dirk M., Lu Xing	4. 巻 55
2. 論文標題 Intermolecular packing and charge transfer in metallofullerene/porphyrin cocrystals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 6018 ~ 6021
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cc02095k	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 Kako Masahiro, Arikawa Yuki, Kanzawa Shinji, Yamada Michio, Maeda Yutaka, Furukawa Makoto, Akasaka Takeshi	4. 巻 102
2. 論文標題 Addition of S Heterocyclic Carbenes to Fullerenes: Formation and Characterization of Dithiomethano Bridged Derivatives	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Helvetica Chimica Acta	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/hlca.201900064	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 Xie Yun-Peng, Pan Changwang, Bao Lipiao, Slanina Zdenek, Akasaka Takeshi, Lu Xing	4. 巻 38
2. 論文標題 Regioselective Coordination of Re ₂ (CO) ₁₀ to Y@C _{2v} (9)-C ₈₂ : An Unprecedented 1 Complex Stabilized by Intramolecular Electron Transfer	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 2259 ~ 2263
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00209	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 Slanina Zdenek, Uhlik Filip, Bao Lipiao, Akasaka Takeshi, Lu Xing, Adamowicz Ludwik	4. 巻 726
2. 論文標題 Calculated relative populations for the Eu@C ₈₂ isomers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 29 ~ 33
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2019.04.011	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 Hu Shuaifeng, Shen Wangqiang, Zhao Pei, Xu Ting, Slanina Zdenek, Ehara Masahiro, Zhao Xiang, Xie Yunpeng, Akasaka Takeshi, Lu Xing	4. 巻 11
2. 論文標題 Crystallographic characterization of Er ₂ C ₂ @C ₂ (43)-C ₉₀ , Er ₂ C ₂ @C ₂ (40)-C ₉₀ , Er ₂ C ₂ @C ₂ (44)-C ₉₀ , and Er ₂ C ₂ @C ₁ (21)-C ₉₀ : the role of cage-shape on cluster configuration	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nanoscale	6. 最初と最後の頁 17319 ~ 17326
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9nr06466d	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 Hu Shuaifeng, Zhao Pei, Shen Wangqiang, Yu Pengyuan, Huang Wenhuan, Ehara Masahiro, Xie Yunpeng, Akasaka Takeshi, Lu Xing	4. 巻 11
2. 論文標題 Crystallographic characterization of Er ₃ N@C _{2n} (2n = 80, 82, 84, 88): the importance of a planar Er ₃ N cluster	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nanoscale	6. 最初と最後の頁 13415 ~ 13422
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9nr04330f	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 Slanina Zdenek, Uhlik Filip, Shen Wangqiang, Akasaka Takeshi, Lu Xing, Adamowicz Ludwik	4. 巻 27
2. 論文標題 Calculations of the relative populations of Lu@C ₈₂ isomers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures	6. 最初と最後の頁 710 ~ 714
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/1536383X.2019.1633523	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 Slanina Zdenek, Uhlik Filip, Feng Lai, Akasaka Takeshi, Lu Xing, Adamowicz Ludwik	4. 巻 27
2. 論文標題 Calculations of the Lu ₃ N@C ₈₀ two-isomer equilibrium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures	6. 最初と最後の頁 382 ~ 386
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/1536383X.2018.1545224	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 Slanina Zdenek, Uhlik Filip, Akasaka Takeshi, Lu Xing, Adamowicz Ludwik	4. 巻 8
2. 論文標題 Computational Modeling of the Ce@C82 Metallofullerene Isomeric Composition	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ECS Journal of Solid State Science and Technology	6. 最初と最後の頁 M118 ~ M121
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/2.0051912jss	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 Ye Xiaoqin, Ling Hanbing, Zhang Rui, Wen Zhiyue, Hu Shuailong, Akasaka Takeshi, Xia Jiangbin, Lu Xing	4. 巻 448
2. 論文標題 Low-temperature solution-combustion-processed Zn-Doped Nb2O5 as an electron transport layer for efficient and stable perovskite solar cells	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Power Sources	6. 最初と最後の頁 227419 ~ 227419
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpowsour.2019.227419	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 C.Pan, L.Bao, X.Yu, H.Fang, Y.Xie, T.Akasaka, X.Lu	4. 巻 12
2. 論文標題 Y2C2n (2n = 92-130) and Crystallographic Characterization of Y2C2@C1(1660)-C108: A Giant Nanocapsule with a Linear Carbide Cluster	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Nano	6. 最初と最後の頁 2065-2069
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnano.8b00384	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 M. Yamada, T.Akasaka, S. Nagase	4. 巻 57
2. 論文標題 Salvaging Reactive Fullerenes from Soot by Exohedral Derivatization	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angew. Chem. Int. Ed.	6. 最初と最後の頁 13394-13405
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1002/anie.201713145	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 Z. Slanina, F. Uhlik, C. Pan, T. Akasaka, X. Lu, L. Adamowicz	4. 巻 710
2. 論文標題 Computed Stabilization for a Giant Fullerene Endohedral: Y2C2@C1(1669)-C108	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem. Phys. Lett.	6. 最初と最後の頁 147-149
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2018.08.051	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 Z. Slanina, F. Uhlik, S. Nagase, T. Akasaka, X. Lu, L. Adamowicz	4. 巻 695
2. 論文標題 Cyclic water-trimer encapsulation into D2(22)-C84 fullerene	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem. Phys. Lett.	6. 最初と最後の頁 245-248
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2018.02.006	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 M. Kako, F. Ozeki, S. Kanazawa, S. Fukazawa, K. Sato, M. Yamada, Y. Maeda, M. Furukawa, T. Akasaka	4. 巻 29
2. 論文標題 Photoreactions of Sc3N@Ih-C80 and Lu3N@Ih-C80 with disilirane: Isolation and characterization of labile 1,2-adducts	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Heteroatom Chem.	6. 最初と最後の頁 e21477
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/hc.21477	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 S. Zheng, J. Zhong, W. Matsuda, P. Jin, M. Chen, T. Akasaka, K. Tsukagoshi, S. Seki, J. Zhou, X. Lu	4. 巻 11
2. 論文標題 Fullerene/Cobalt Porphyrin Charge-Transfer Cocrystals: Excellent Thermal Stability and High Mobility	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nano Res.	6. 最初と最後の頁 1917-1927
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s12274-017-1809-7	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 Morinaka Yuta, Zhang Rui, Sato Satoru, Nikawa Hidefumi, Kato Tatsuhisa, Furukawa Ko, Yamada Michio, Maeda Yutaka, Murata Michihisa, Wakamiya Atsushi, Nagase Shigeru, Akasaka Takeshi, Murata Yasujiro	4. 巻 56
2. 論文標題 Fullerene C70 as a Nanoflask that Reveals the Chemical Reactivity of Atomic Nitrogen	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 6488 ~ 6491
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201701158	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 Yamada Michio, Abe Tsuneyuki, Saito Chiharu, Yamazaki Toshiki, Sato Satoru, Mizorogi Naomi, Slanina Zdenek, Uhlik Filip, Suzuki Mitsuaki, Maeda Yutaka, Lian Yongfu, Lu Xing, Olmstead Marilyn M., Balch Alan L., Nagase Shigeru, Akasaka Takeshi	4. 巻 23
2. 論文標題 Adamantylidene Addition to M3N@Ih-C80 (M=Sc, Lu) and Sc3N@D5h-C80: Synthesis and Crystallographic Characterization of the [5,6]-Open and [6,6]-Open Adducts	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 6552 ~ 6561
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201700049	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 Kako Masahiro, Sugiura Takeshi, Miyabe Kyosuke, Yasui Masanori, Yamada Michio, Maeda Yutaka, Guo Jing-Dong, Nagase Shigeru, Akasaka Takeshi	4. 巻 12
2. 論文標題 Preparation, Structural Determination, and Characterization of Electronic Properties of [5,6]- and [6,6]-Carbosilylated Sc3N@Ih-C80	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 1391 ~ 1399
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.201700506	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 Akasaka Takeshi, Nakata Akira, Rudolf Marc, Wang Wei-Wei, Yamada Michio, Suzuki Mitsuaki, Maeda Yutaka, Aoyama Ryo, Tsuchiya Takahiro, Nagase Shigeru, Guldi Dirk M.	4. 巻 82
2. 論文標題 Synthesis and Photoinduced Electron-Transfer Reactions in a La2@Ih-C80-Phenoxazine Conjugate	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ChemPlusChem	6. 最初と最後の頁 1067 ~ 1072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cplu.201600391	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 Kako Masahiro, Minami Kazuya, Kuroiwa Taiki, Fukazawa Shinpei, Arikawa Yuki, Yamada Michio, Maeda Yutaka, Li Qiao-Zhi, Nagase Shigeru, Akasaka Takeshi	4. 巻 22
2. 論文標題 Photoreactions of Endohedral Metallofullerene with Siliranes: Electronic Properties of Carbosilylated Lu ₃ N@Ih-C80	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 850 ~ 850
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules22050850	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 Slanina Zdenek, Uhlik Filip, Nagase Shigeru, Akasaka Takeshi, Adamowicz Ludwik, Lu Xing	4. 巻 22
2. 論文標題 Eu@C72: Computed Comparable Populations of Two Non-IPR Isomers	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 1053 ~ 1053
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules22071053	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 Zheng Shushu, Zhong Junwen, Matsuda Wakana, Jin Peng, Chen Muqing, Akasaka Takeshi, Tsukagoshi Kazuhito, Seki Shu, Zhou Jun, Lu Xing	4. 巻 11
2. 論文標題 Fullerene/cobalt porphyrin charge-transfer cocrystals: Excellent thermal stability and high mobility	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nano Research	6. 最初と最後の頁 1917 ~ 1927
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s12274-017-1809-7	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 Slanina Zdenek, Uhlik Filip, Nagase Shigeru, Akasaka Takeshi, Adamowicz Ludwik, Lu Xing	4. 巻 6
2. 論文標題 Computational Comparison of the Water-Dimer Encapsulations into D2(22)-C84 and D2d(23)-C84	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ECS Journal of Solid State Science and Technology	6. 最初と最後の頁 M3113 ~ M3115
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/2.0201706jss	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 Slanina Zdenek, Uhlik Filip, Adamowicz Ludwik, Akasaka Takeshi, Nagase Shigeru, Lu Xing	4. 巻 43
2. 論文標題 Stability issues in computational screening of carbon nanostructures: illustrations on La endohedrals	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Molecular Simulation	6. 最初と最後の頁 1472 ~ 1479
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/08927022.2017.1321752	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 M. Yamada, S. Sato, W. Choi, S. Seki, T. Abe, M. Suzuki, Y. Maeda, S. Nagase, T. Akasaka	4. 巻 46
2. 論文標題 Temperature Dependence of Anisotropic Transient Conductivity of a La@C _{2v} -C ₈₂ (Ad) Crystal	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 97 ~ 975
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.170279	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

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 1件/うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Yuta Maeda, Shinji Kanzawa, Masahiro Kako, Michio Yamada, Yutaka Maeda, Makoto Furukawa, Takeshi Akasaka
2. 発表標題 Reactions of S-Heterocyclic Carbenes with Fullerenes: Preparation and Characterization of Dithiomethano-derivatives
3. 学会等名 第58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 2020年

1. 発表者名 Kanzawa, S.; Ozeki, F.; Fukazawa, S.; Kako, M.; Sato, K.; Yamada, M.; Maeda, Y.; Furukawa, M.; Akasaka, T.
2. 発表標題 Photoreactions of Sc ₃ N@Ih-C ₈₀ and Lu ₃ N@Ih-C ₈₀ with Disilirane: Characterization of Labile 1,2-Adducts
3. 学会等名 第56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 2019年

1. 発表者名 安達拓哉・田中貴大・鈴木光明・山田道夫・前田優・Zdenek Slanina・永瀬茂・赤阪健
2. 発表標題 La@Cs(6)-C82とNi(OEP)の共結晶化
3. 学会等名 第56回 基礎有機化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Michio Yamada, Satoru Sato, Wookjin Choi, Shu Seki, Tsuneyuki Abe, Mitsuaki Suzuki, Yutaka Maeda, Shigeru Nagase, Takeshi Akasaka
2. 発表標題 Temperature Dependence of Anisotropic Transient Conductivity of a La@C2v-C82(Ad) Crystal
3. 学会等名 第54回フラーレン・ナノチューブ・グラフェンシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 uta Takano, Ryo Tashita, Mitsuaki Suzuki, Hiroshi Imahori, Takeshi Akasaka
2. 発表標題 Anisotropic magnetic properties of an endohedral metallofullerene for molecular location sensing
3. 学会等名 256th The American Chemical Society Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takeshi Akasaka
2. 発表標題 New Vistas in Fullerene World: Endohedral Metallofullerenes
3. 学会等名 The 3th International Workshop on "Fullerene Science and Technology" (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 深澤新平、杉浦健、宮部恭輔、加固昌寛、赤阪健
2. 発表標題 金属内包フラーレンと環状ケイ素化合物との光反応
3. 学会等名 日本化学会第7回CSJ化学フェスタ2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 有川裕貴、加固昌寛、山田道夫、前田優、赤阪健
2. 発表標題 金属内包フラーレンSc ₃ N@C ₈₀ とシリレンの付加反応
3. 学会等名 日本化学会第7回CSJ化学フェスタ2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 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
2. 発表標題 Photoreaction of Sc ₃ N@Ih-C ₈₀ with Disilirane: Formation and Isomerization of 1,2-,1,3-, and 1,4-Adducts
3. 学会等名 深澤新平、佐藤雄一、加固昌寛、安井正憲、山田道夫、前田優、赤阪健
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yuta Takano, Ryo Tashita, Mitsuaki Suzuki, Hiroshi Imahori, Takeshi Akasaka
2. 発表標題 Anisotropic magnetic properties of an endohedral metallofullerene for molecular location sensing
3. 学会等名 Annual Meeting of American Chemical Society,
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Mitsuaki Suzuki, Takeshi Akasaka
2. 発表標題 Structural analysis of non-IPR endohedral metallofullerenes
3. 学会等名 2nd International symposium on Nanocarbons - fullerenes, Endofullerenes, Carbon Nanotubes, Graphenes and Carbon Nanostructures, HUST, Wuhan, China
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Michio Yamada, Takeshi Akasaka
2. 発表標題 Unveiling the Unique Chemical reactivity of Endohedral Metallofullerenes
3. 学会等名 2nd International symposium on Nanocarbons - fullerenes, Endofullerenes, Carbon Nanotubes, Graphenes and Carbon Nanostructures
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山田道夫、赤坂 健
2. 発表標題 特異な金属内包フラーレン及びその誘導体の電子状態
3. 学会等名 第56回電子スピンサイエンス学会年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 M. Yamada, S. Sato, W. Choi, S.Seki, T. Abe, M. Suzuki, Y. Maeda, S. Nagase, T. Akasaka
2. 発表標題 Temperature dependence of anisotropic transient conductivity of a La@C _{2v} -C ₈₂ (Ad) crystal
3. 学会等名 第54回フラーレ・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

筑波大学TARAセンター赤坂研究室
http://www.tara.tsukuba.ac.jp/~akasaka-lab/

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	山田 道夫 (Yamada Michio) (00583098)	東京学芸大学・教育学部・准教授 (12604)	
研究分担者	加固 昌寛 (Kako Masahiro) (10233678)	電気通信大学・大学院情報理工学研究所・教授 (12612)	
研究分担者	前田 優 (Maeda Yutaka) (10345324)	東京学芸大学・教育学部・准教授 (12604)	
研究分担者	鈴木 光明 (Suzuki Mitsuaki) (40741757)	城西大学・理学部・助教 (32403)	