

令和 6 年 5 月 31 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2019～2023

課題番号：19H02552

研究課題名（和文）大環状芳香族分子のナノ細孔性固体のリチウムイオン電池負極材料への応用

研究課題名（英文）Application of nanoporous solids of macrocyclic aromatic molecules to lithium-ion battery negative electrode materials

研究代表者

佐藤 宗太（Sato, Sota）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・特任教授

研究者番号：40401129

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、分子性孔あきグラフェンを集積して細孔性材料を構築し、その独特な構造を特異な機能へと連結することを目指して研究を行った。新たな分子性孔あきグラフェンの開発にとりくむ一方で、さまざまな最先端の構造解析手法を適用することで、結晶性固体中における集積構造の解明に成功した。特に、電池負極材料として還元状態の構造に興味をもち、化学的還元状態の結晶構造解析に成功した。さらに、得られた固体物質に対して、リチウムイオン電池負極材料としての応用や、ガス吸着材料としての応用など、幅広い機能発現を見出すことができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

分子性孔あきグラフェンは比較的新しい化合物群であり、中心部位に空孔を有する「グラフェン」のような分子、という独特の構造的特徴からその物性・機能に興味を持たれている。一方で、その分子量はC60フラーレンを超えることが多く、有機化合物としては大きな構造であるために、特に結晶性固体状態での構造解析が困難である。本研究で、困難な構造解析を実証し、さらに独特な構造に由来する特異機能を解明したことで、この新しい化合物群の固体をどう取り扱ったらよいか学術的なアプローチを示し、材料としての有用性を社会的に示すことができた。

研究成果の概要（英文）：In this study, we aimed to construct porous materials by integrating molecular porous graphene and to link their unique structures to unique functions. While working on the development of a new molecular porous graphene, we succeeded in elucidating the integrated structure in a crystalline solid by applying various cutting-edge structural analysis methods. In particular, we interested in the structure of a reduced state from the viewpoint of a battery negative electrode material and succeeded in analyzing the crystal structure of a chemically reduced state. Furthermore, we were able to discover a wide range of functions for the obtained solid materials, including applications as negative electrode materials for lithium-ion batteries and as gas adsorption materials.

研究分野：構造有機化学

キーワード：リチウムイオン電池 負極材料 大環状分子 ナノ細孔 芳香族炭化水素

1. 研究開始当初の背景

ベンゼン、ナフタレン、アントラセン等に代表される芳香族分子を、単結合を用いて環状に連結すると、中央分にナノサイズの空洞を有する大環状芳香族分子が得られる。材料としての視点からは、グラファイトの部分構造、すなわち、グラフェンの分子版と見なすことができ、ナノサイズの原子欠損部位を有する点に顕著な構造的特徴を有する。研究開始当初、このような分子性孔あきグラフェンの歴史は浅く、どのような新しい分子性のグラフェン構造を合成することができ、その独特な構造がどのような特異な物性・機能を発現するのか、興味をもたれていたものの、事例は限られていた。特に、有機化合物としての取り扱いを考えると、新規構造を合成することができても、低い溶解性が分離精製・構造解析の支障になることが多く、官能基が乏しいことから MS 解析が難しく、また、環状の周期構造が示す対称性によって NMR 解析が難しい。本研究では、研究開始当初、研究代表者が所属していた研究室が独自に開発した大環状芳香族分子の合成手法を基盤とし、新規構造をもつ分子の合成を探索するとともに、難解な構造決定を克服することで、知見が限られていた構造と物性・機能との相関理解に基づく構造有機化学の展開をめざした。

2. 研究の目的

新たな大環状芳香族分子の合成探索を基盤としながら、得られた化合物の構造解析、特に、結晶性固体の状態での構造解析を達成するためのアプローチ法を開拓することをめざした。得られた構造を基に、固体物性・機能を探索し、構造との相関理解を深めながら基礎的な構造有機化学の知見を得ることを目的とした。

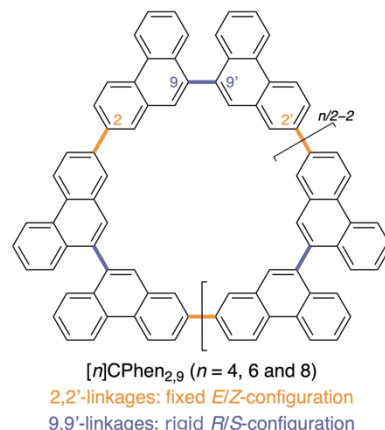
3. 研究の方法

研究開始当初、研究代表者が所属していた研究室が独自に開発した大環状芳香族分子の合成手法を用い、種々の分子を合成した。得られた化合物は、繰り返し単位の異なる類縁体の混合物であることが多いが、溶解度の低さが問題になりながらも単離精製を行い、それぞれ、NMR, MS, さらに調製に成功した結晶性固体に対しては回折実験による構造決定を行った。各化合物に対して、物性・機能解明にも着手し、特に結晶性固体中における独特な充填構造に由来する物性・機能を解明することに注力した。

4. 研究成果

大環状芳香族分子の合成法の探索を行った。新規構造の創出のみならず、得られた分子の機能・物性を探索することを念頭に、グラムスケールでの合成・単離スキームの確立を行ってきた。分離すべき不純物・異性体・多量体の混合状態や、溶解度や極性といった化合物の性状を考察し、複数種の分取 HPLC カラムの利用や、ソックスレー抽出器や吸引ろ過器などの用いるガラス器具の工夫も凝らした溶解度差を利用した再結晶により、効率的に標的化合物を得る手法を確立した。さらに、新規大環状分子の分子設計の指針にも変革をもたらし、3 方向に結合を有する芳香族分子の sp^2 炭素を、1,3,5-置換ベンゼンに置き換えた分子合成法を確立した。種々のカップリング反応を段階的に用いることで、複雑で巨大な大環状芳香族分子を構築することに成功した。(J. Org. Chem. 2019, 84, 3500-3507; Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 6567-6571; Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202204035.)

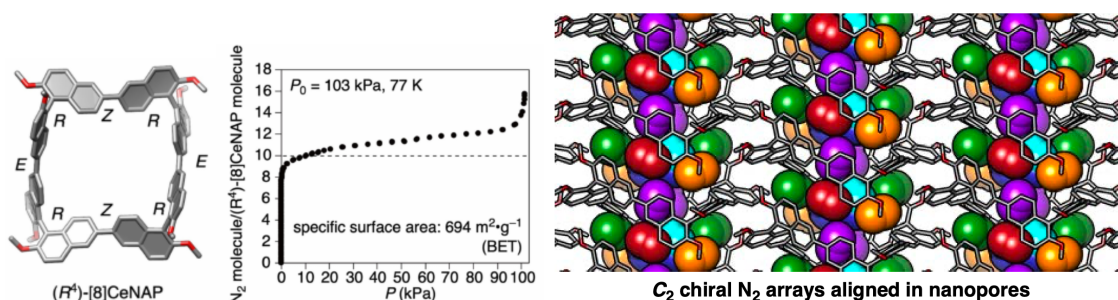
新たに合成した *E/Z* および *R/S* ピアリアル連結構造を有する大環状芳香族分子、 $[n]$ cyclo-2,9-phenanthrenylenes ($[n]$ CPhen_{2,9}, $n = 4, 6$ and 8 , 右図参照) について、環状立体異性化を詳細に調べた。合成法は、単位構造としてフェナントレン二量体を出発物質に用い、Ni を用いた山本カップリング反応による環化反応を行ったところ、 $[6]$ CPhen_{2,9} が主生成物、 $[4]$ CPhen_{2,9} および $[8]$ CPhen_{2,9} 副生成物として得られた。各異性体を単離し、構造決定を行った。特に、結晶性固体の調製に成功し、単結晶 X 線構造解析によって、異性体構造を明瞭に構造決定できた。分子構造が複雑で大きいために、実験室に設置した X 線回折計では限界があり、放射光 X 線を用いることで構造解析の障壁を乗り越えることに成功した。得られた化合物に対して立体異性化を調べたところ、*E/Z* 連結は実験的に分離可能な異性体を与えることがなく、*R/S* 連結の軸不斉に由来するキラリティを有



する異性を単離できることがわかった。これらの大環状芳香族分子の構造的特徴が異性化の化学を決定付けていることを、理論計算も併用することで明らかにできた。(Org. Biomol. Chem. 2020, 18, 4949-4955.)

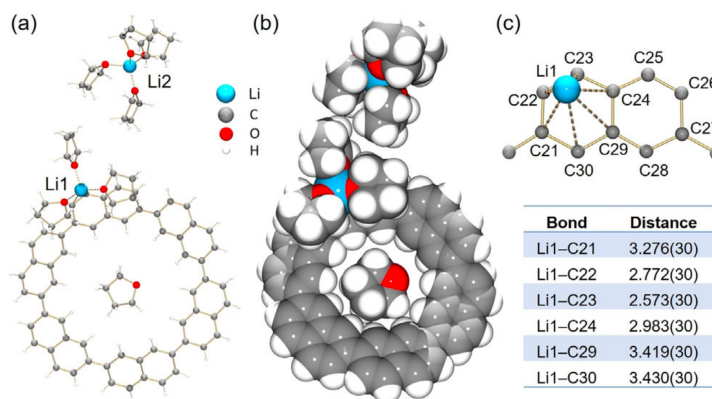
関連する知見として、[4]helicene を環状化させた大環状芳香族分子の立体異性化についても詳細な調査を行い、これらの化合物群の異性化反応に関する理解を深めることができた。本研究においても、放射光 X 線回折による高精度な分子構造解析が重要な役割を果たした。(Chem. Lett. 2020, 50, 110-112.)

出発物質として軸不斉を有するナフタレン二量体を用い、環化反応によって調製した大環状芳香族分子は、軸不斉由来するキラリティを有する(下図)。Rの軸不斉を有するナフタレン二量体が4ユニット環化反応することで得られた(R⁴)-[8]-CeNAPは、ナフタレン八量体の構造を有し、その結晶性固体においては、分子中央部の孔が向きを揃えて並んだ、1次元ナノ細孔構造を有することが単結晶 X 線構造解析によって明らかになった。この1次元ナノ細孔の特性を探索した結果、真空下で結晶構造を保ったまま細孔内の溶媒分子や気体分子を除去できることがわかり、ガス吸着機能を有することがわかった。高精度なガス吸着状態の分子構造解析を行うために、窒素ガス吸着実験を放射光 X 線を用いた粉末回折実験により観察し、得られた回折パターンに対して Rietveld 解析による分子レベルでの構造解析を行った結果、興味深いことに、吸着した窒素ガス分子が1次元ナノ細孔内で C₂ キラリティの対称性を示しながら配列していることがわかった。(Chem. Asian J. 2020, 15, 3829-3835.)



ナフタレンを環状に連結した[6]-cyclo-naphthalene ([6]CNAP)は、結晶性固体の調製条件を制御することで、分子中央の孔が向きを揃えて並んだ、1次元ナノ細孔構造を有する結晶性固体を調製でき、また、分子中央の孔が隣り合うナフタレン環によって塞がれた構造を有する結晶性固体も調製できる。この1次元ナノ細孔は興味深い機能を示し、リチウムイオン電池の負極材料として応用した際に、スタッキングしているナフタレン環部位だけでなく1次元ナノ細孔もリチウムイオンの貯蔵場所として機能することで、大容量化が図れる。また、リチウムイオンの通り道としても機能するために、充電・放電時にスムーズなリチウムイオンの出し入れが可能となり、高効率なリチャージャブルバッテリーを実現できる。(Small 2016, 12, 3381-3387.)

本研究では、このような[6]CNAPの還元状態の構造に興味を持ち、金属 Li または K による化学還元反応後の構造解析を行った。2価の還元状態での単結晶調製に成功し、単結晶 X 線回折による構造解析を行った(下図)。還元状態において、ビアリアル連結構造を介してナフタレンの間のπ共役系が伸びることが、理論計算を併用して明らかとなり、還元状態における構造的特徴を解明することができた。(Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 11201-11205.)



以上のように、大環状芳香族分子の構造解明と、独特な結晶性固体中の集積構造から得られる機能の解明を行ってきた。構造解明のためには、放射光 X 線を利用した高精度な構造解析が重要である。さらに、未発表ではあるが、電子線回折による構造解析も有用であることがわかってきており、最新の手法を積極的に取り入れた研究の展開の重要性が明らかになってきている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計34件（うち査読付論文 34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 Terasawa Yukana, Ohhara Takashi, Sato Sota, Yoshida Satoshi, Asahi Toru	4. 巻 78
2. 論文標題 Single-crystal structure analysis of non-deuterated triglycine sulfate by neutron diffraction at 20 and 298 K: a new disorder model for the 298 K structure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications	6. 最初と最後の頁 306 ~ 312
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2056989022000858	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ikemoto Koki, Akiyoshi Misato, Mio Tatsuru, Nishioka Kaito, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 61
2. 論文標題 Synthesis of a Negatively Curved Nanocarbon Molecule with an Octagonal Omphalos via Design-of-Experiments Optimizations Supplemented by Machine Learning	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202204035
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202204035	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 Gong Zongcheng, Xiang Qin, Li Ke, Xu Zhuofan, Hu Jinlian, Ni Yong, Sato Sota, Sun Zhe	4. 巻 40
2. 論文標題 Pentagon Containing Doublet Graphene Fragments with Edge-Dependent Spin/Charge Distribution	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chinese Journal of Chemistry	6. 最初と最後の頁 2525 ~ 2530
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cjoc.202200344	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 Inada Moeka, Udagawa Akihiro, Sato Sota, Asahi Toru, Saito Kei	4. 巻 21
2. 論文標題 Photo-conversion of self-assembled structures into continuous covalent structures via [2 + 2]-cycloaddition reactions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Photochemical and Photobiological Sciences	6. 最初と最後の頁 2169 ~ 2177
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s43630-022-00286-0	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 Wang Peng, Hu Jinlian, Xu Zhuofan, Pu Zhaofangzhou, Sato Sota, Zhang Xiaotao, Hu Wenping, Sun Zhe	4. 巻 59
2. 論文標題 Synthesis and structure elucidation of triarylmethyl radicals with anthryl substitution	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 2015 ~ 2018
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CC06083C	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 Zhou Zheng, Wei Zheng, Ikemoto Koki, Sato Sota, Isobe Hiroyuki, Petrukhina Marina A.	4. 巻 60
2. 論文標題 Chemical Reduction of a Nanosized [6]Cyclo-2,7-naphthylene Macrocyclic	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 11201 ~ 11205
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202100942	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 Yang Yong, Blacque Olivier, Sato Sota, Jurek Michal	4. 巻 60
2. 論文標題 Cycloparaphenylene - Phenalenyl Radical and Its Dimeric Double Nanohoop	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 13529 ~ 13535
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202101792	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 Yang Yong, Huangfu Shangxiong, Sato Sota, Jurek Michal	4. 巻 23
2. 論文標題 Cycloparaphenylene Double Nanohoop: Structure, Lamellar Packing, and Encapsulation of C60 in the Solid State	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 7943 ~ 7948
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.1c02950	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 Kun, Matsumoto Masataka, Nakagawa Kenta, Matsuda Azusa, Shino Genki, Sato Sota, Ikeda Takuji, Asahi Toru	4. 巻 90
2. 論文標題 Giant Optical Anisotropy in High Temperature Superconducting Cuprate Bi2Sr2CaCu2O8+	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 113702 ~ 113702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.113702	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 Taniguchi Yoshimasa, Kikuchi Takashi, Sato Sota, Fujita Makoto	4. 巻 28
2. 論文標題 Comprehensive Structural Analysis of the Bitter Components in Beer by the HPLC-Assisted Crystalline Sponge Method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202103339
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202103339	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 Li Ke, Xu Zhuofan, Xu Jun, Weng Taoyu, Chen Xing, Sato Sota, Wu Jishan, Sun Zhe	4. 巻 143
2. 論文標題 Overcrowded Ethylene-Bridged Nanohoop Dimers: Regioselective Synthesis, Multiconfigurational Electronic States, and Global Huckel/Mobius Aromaticity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 20419 ~ 20430
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.1c10170	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 Mio Tatsuru, Ikemoto Koki, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 59
2. 論文標題 Synthesis of a Hemispherical Geodesic Phenine Framework by a Polygon Assembling Strategy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 6567 ~ 6571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201915509	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikemoto Koki, Yang Seungmin, Naito Hisashi, Kotani Motoko, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 11
2. 論文標題 A nitrogen-doped nanotube molecule with atom vacancy defects	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 1807
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-020-15662-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshii Asami, Onaka Yuzuka, Ikemoto Koki, Izumi Tomoo, Sato Sota, Kita Hiroshi, Taka Hideo, Isobe Hiroyuki	4. 巻 15
2. 論文標題 Acyclic, Linear Oligo meta phenylenes as Multipotent Base Materials for Highly Efficient Single layer Organic Light emitting Devices	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 2181 ~ 2186
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.202000521	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsuno Taisuke, Someya Maki, Sato Sota, Maeda Satoshi, Isobe Hiroyuki	4. 巻 59
2. 論文標題 Ineffective OH Pinning of the Flipping Dynamics of a Spherical Guest within a Tight Fitting Tube	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 14570 ~ 14576
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202005538	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 Yang Yong, Nanjo Yuki, Isobe Hiroyuki, Sato Sota	4. 巻 18
2. 論文標題 Synthesis and stereoisomerism of [n]cyclo-2,9-phenanthrylene congeners possessing alternating E/Z- and R/S-biaryl linkages	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Organic & Biomolecular Chemistry	6. 最初と最後の頁 4949 ~ 4955
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D00B01064B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsuno Taisuke, Fukunaga Kengo, Kobayashi Shuhei, Sarkar Parantap, Sato Sota, Ikeda Takuji, Isobe Hiroyuki	4. 巻 15
2. 論文標題 Crystalline Naphthylene Macrocycles Capturing Gaseous Small Molecules in Chiral Nanopores	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 3829 ~ 3835
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.202000876	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsuno Taisuke, Yang Yong, Nanjo Yuki, Isobe Hiroyuki, Sato Sota	4. 巻 50
2. 論文標題 A Case Study of Stereoisomerism with [6]Cyclo[4]helicenylenes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 110 ~ 112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.200717	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 Terasawa Yukana, Kikuta Toshio, Ichiki Masaaki, Sato Sota, Ishikawa Kazuhiko, Asahi Toru	4. 巻 151
2. 論文標題 Preferences of polarity and chirality in triglycine sulfate crystals by alanine ghost	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics and Chemistry of Solids	6. 最初と最後の頁 109890 ~ 109890
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpccs.2020.109890	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sun Zhe, Ikemoto Koki, Fukunaga Toshiya M., Koretsune Takashi, Arita Ryotaro, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 363
2. 論文標題 Finite phenine nanotubes with periodic vacancy defects	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Science	6. 最初と最後の頁 151 ~ 155
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/science.aau5441	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sun Zhe, Mio Tatsuru, Ikemoto Koki, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 84
2. 論文標題 Synthesis, Structures, and Assembly of Geodesic Phenine Frameworks with Isoreticular Networks of [n]Cyclo-para-phenylenes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 3500 ~ 3507
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.9b00085	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kogashi Kanako, Matsuno Taisuke, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 58
2. 論文標題 Narrowing Segments of Helical Carbon Nanotubes with Curved Aromatic Panels	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 7385 ~ 7389
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201902893	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshii Asami, Ikemoto Koki, Izumi Tomoo, Taka Hideo, Kita Hiroshi, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 21
2. 論文標題 Periphery Design of Macrocyclic Materials for Organic Light-Emitting Devices with a Blue Phosphorescent Emitter	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 2759 ~ 2762
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.9b00717	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsuno Taisuke, Fukunaga Kengo, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 58
2. 論文標題 Retarded Solid State Rotations of an Oval Shaped Guest in a Deformed Cylinder with CH-Arrays	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 12170 ~ 12174
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201907040	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikemoto Koki, Tokuhira Toshiki, Uetani Akari, Harabuchi Yu, Sato Sota, Maeda Satoshi, Isobe Hiroyuki	4. 巻 85
2. 論文標題 Fluorescence Enhancement of Aromatic Macrocycles by Lowering Excited Singlet State Energies	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 150 ~ 157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.9b02379	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsuno Taisuke, Nakai Yusuke, Maniwa Yutaka, Someya Maki, Sato Sota, Isobe Hiroyuki	4. 巻 15
2. 論文標題 Regulated Single Axis Rotations of a Carbonaceous Guest in a van der Waals Complex with an Entropy Cost	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 273 ~ 278
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.201901638	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakama Takahiro, Rossen Anouk, Ebihara Risa, Yagi-Utsumi Maho, Fujita Daishi, Kato Koichi, Sato Sota, Fujita Makoto	4. 巻 14
2. 論文標題 Hysteresis behavior in the unfolding/refolding processes of a protein trapped in metallo-cages	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 2910-2914
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2SC05879K	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 Tay Gavin, Wayama Toshiaki, Takezawa Hiroki, Yoshida Satoshi, Sato Sota, Fujita Makoto, Oguri Hiroki	4. 巻 62
2. 論文標題 Synthetic Modulation of an Unstable Dehydrosecodine type Intermediate and Its Encapsulation into a Confined Cavity Enable Its X ray Crystallographic Observation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202305122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202305122	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 Tsunekawa Eisuke, Otsubo Yusuke, Yamada Yusuke, Ikeda Akihito, Adachi Naruhiko, Kawasaki Masato, Takasu Akira, Aramaki Shinji, Senda Toshiya, Sato Sota, Yoshida Satoshi, Fujita Makoto, Sawada Tomohisa	4. 巻 145
2. 論文標題 X-ray and Electron Diffraction Observations of Steric Zipper Interactions in Metal-Induced Peptide Cross- Nanostructures	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 16160-16165
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.3c04710	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 Ono-Ogasawara Chinatsu, Yamamoto Shunya, Ogura Yusuke, Okamura Hironori, Takaba Kiyofumi, Yoshida Satoshi, Sato Sota, Yonekura Koji, Takikawa Hirosato	4. 巻 127
2. 論文標題 Synthesis of (\pm)-zeapyranolactone, a noncanonical strigolactone isolated from maize, and determination of its overall relative configuration	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Tetrahedron Letters	6. 最初と最後の頁 154695-154695
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tetlet.2023.154695	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 Jung Youngcheol, Mitsuhashi Takaaki, Sato Sota, Senda Miki, Senda Toshiya, Fujita Makoto	4. 巻 145
2. 論文標題 Function and Structure of a Terpene Synthase Encoded in a Giant Virus Genome	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 25966-25970
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.3c10603	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 Yamanomoto Ken, Yamamoto Kota, Yoshida Satoshi, Sato Sota, Akiyama Takahiko	4. 巻 60
2. 論文標題 Enantioselective synthesis of 3-(N-indolyl)quinolines containing axial and central chiralities	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 582-585
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CC05142K	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 Honda Tasuku, Ogata Daiji, Tsurui Makoto, Yoshida Satoshi, Sato Sota, Muraoka Takahiro, Kitagawa Yuichi, Hasegawa Yasuchika, Yuasa Junpei, Oguri Hiroki	4. 巻 63
2. 論文標題 Rapid Synthesis of Chiral Figure Eight Macrocycles Using a Preorganized Natural Product Based Scaffold	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202318548
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202318548	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 Kira Mizuki, Shiga Yuta, Nakagawa Kenta, Matsumoto Ayaka, Tokita Keigo, Terasawa Yukana, Zhang Kun, Tsutao Koichi, Nakanishi Takuya, Yoshida Satoshi, Sato Sota, Shibata Norio, Asahi Toru	4. 巻 24
2. 論文標題 Chiral Inversion of Thalidomide During Crystal Growth by Sublimation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 3133-3139
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.3c01030	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29件（うち招待講演 18件 / うち国際学会 8件）

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 New educational tool for molecular chemistry, "VR-MD"
3. 学会等名 天津大学分子+研究院 講演会（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 薬師寺 諒、吉田知史、佐藤宗太、藤田 誠
2. 発表標題 キャピラリー結晶スポンジ法 (cap-CS法) の開発とデバイス化分子構造解析
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会 (2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 高田雄介、奥村英夫、佐藤宗太、藤田 誠
2. 発表標題 プレート結晶スポンジ法の開発による分子構造解析
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会 (2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 秋吉美里、池本晃喜、美尾 樹、西岡海人、佐藤宗太、磯部寛之
2. 発表標題 実験計画法と機械学習を活用した大環状化反応条件最適化による巨大ナノカーボン分子の合成
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会 (2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田知史、馬場清喜、仲村勇樹、佐藤宗太、藤田 誠
2. 発表標題 放射光X線マルチ測定を活用するマイクロ結晶スポンジ法 (micro-CS法) の開発
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会 (2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Youngcheol Jung、三橋隆章、千田美紀、佐藤宗太、千田俊哉、藤田 誠
2. 発表標題 巨大ウイルスのゲノムに見いだされたテルペン合成酵素の機能・構造解析
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会 (2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 Chiral Intertwined Spirals and Chiroptical Properties Dictated by Cylinder Helicity
3. 学会等名 CEMS Topical Meeting Online "Excited-State Chemistry of Functional Materials" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 機能性ナノ孔を有する結晶材料
3. 学会等名 日本農薬学会第46大会・農薬バイオサイエンス研究会シンポジウム「生物と化学のはざままで」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 新型電池オープンラボ第29回講演会
3. 学会等名 神奈川大学リチウムイオン電池オープンラボ(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 放射光X線が切り拓く有機分子構造解析
3. 学会等名 兵庫県立大学大学院理学研究科フォトンサイエンスセミナー(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 Functional crystalline materials based on macrocyclic nanochannels
3. 学会等名 XXV General Assembly and Congress of the International Union of Crystallography - IUCr 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 Synthetic approach to biomolecular science by cyborg supramolecular chemistry
3. 学会等名 New Challenge in Interdisciplinary and Multiscale Supramolecular Sciences in PACIFICHEM2020/2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 寺澤有果菜、大原高志、佐藤宗太、朝日 透
2. 発表標題 硫酸トリグリシン結晶の中性子による構造解析
3. 学会等名 2021年度日本結晶学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 チョウコン、中川鉄馬、松本匡貴、篠 元輝、松田 梓、池田卓史、佐藤宗太、朝日 透
2. 発表標題 銅酸化物高温超伝導体Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O ₈₊ における巨大な光学的異方性
3. 学会等名 2021年度日本結晶学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉良美月、鷲尾滉一、チョウコン、寺沢有果菜、佐藤宗太、吉田知史、柴田哲男、朝日 透
2. 発表標題 サリドマイドの単結晶育成およびG-HAUPによる光学的性質の測定
3. 学会等名 2021年度日本結晶学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 美尾 樹、池本晃喜、佐藤宗太、磯部寛之
2. 発表標題 多角形組立戦略によるフェニンナノカーボン分子の合成
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田知史、吉良美月、寺澤有果菜、朝日 透、馬場清喜、仲村勇樹、佐藤宗太、藤田 誠
2. 発表標題 サリドマイド湾曲薄膜結晶の放射光マイクロビーム自動測定/処理による構造解析
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Youngcheol Jung、三橋隆章、千田美紀、千田俊哉、佐藤宗太、藤田 誠
2. 発表標題 巨大ウイルス由来二次代謝酵素の結晶スポンジ法を用いた機能解析、および、そのタンパク質X線結晶構造解析
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 最先端X線回折測定による 結晶構造解析
3. 学会等名 琉球大学研究基盤センター 公開セミナー（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 Crystalline Materials with Functional Nanopores
3. 学会等名 Molecular Chirality Asia 2020（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 精密構造解析により解明された分子構造に基づく新機能材料の開発
3. 学会等名 早稲田大学朝日研究室セミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 Advanced Functions Derived from Unique Structures of Post Nanocarbon Molecules
3. 学会等名 RIKEN Symposium on Advanced Molecular Materials and their Applications（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 精密分子構造解析が切り拓く機能性材料
3. 学会等名 第51回構造有機化学若手の会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 ナノカーボン材料を「分子」でつくってみる：自由に設計して思い通りの機能を生み出そう
3. 学会等名 日本化学会秋季事業 第9回CSJ化学フェスタ2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 Chiroptical Properties Derived from Unique Macrocyclic Structures
3. 学会等名 S1 Symposium: Frontier and Perspectives of Macrocycles and Metallomacrocycles in Supramolecular Chemistry in The 73rd Conference of Japan Society of Coordination Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Sato
2. 発表標題 Integrated Molecular Structure Analysis for Academia and Industry
3. 学会等名 S4 Symposium: Great Ideas Come from “Advanced Fundamental Measurements” in The 73rd Conference of Japan Society of Coordination Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 持続可能な社会を支える超分子化学を用いた構造解析
3. 学会等名 超分子研究会・精密ネットワークポリマー研究会 第7回合同講座 -持続可能な社会に貢献する機能性超分子・高分子の世界- (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 統合分子構造解析拠点「FS CREATION」:痕跡量の有機分子の構造解析への挑戦
3. 学会等名 相模中央化学研究所 第8回材料相模セミナー/第1回有機金属相模セミナー (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤宗太
2. 発表標題 柏の葉「FS CREATION」における産学連携した統合分子構造解析
3. 学会等名 産総研 触媒化学融合研究センター特別講演会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 一木隆範, 喜多浩之, 馬渡和真, 高井まどか, 内田さやか, 八井 崇, 清水久史, 高木紀明, 柴田直哉, 佐藤宗太, 井上博之, 猪熊泰英, 上野博史	4. 発行年 2024年
2. 出版社 丸善出版株式会社	5. 総ページ数 114
3. 書名 東京大学工学教程 分析化学III: 機器分析・構造解析	

〔産業財産権〕

〔その他〕

東京大学 社会連携講座「統合分子構造解析講座」
<https://satolab.t.u-tokyo.ac.jp/>

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
---------	---------