

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 5 月 23 日現在

機関番号：14603

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2022～2023

課題番号：22K19067

研究課題名(和文)新規球状ナノカーボンの合理的設計と短工程合成法の開発

研究課題名(英文)Rational design and development of short-process synthesis of novel spherical nanocarbons

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) 5,000,000円

研究成果の概要(和文)：超分子的相互作用より強固である共有結合からなるケージ状分子の合成に挑戦した。広い共役系を有するお椀型分子を鍵出発物質として対面型二量体にすることで、ボトムアップ的に球形ナノカーボンを短工程で構築し、分子設計自由度の高いケージ状分子を合成できた。本ケージ状分子をc-cageと名付けた。c-cageは修飾位置の違いによるラセミ体とメソ体が約1:1の混合物として得られた。本研究ではこれまでに、ケージの合成法の確立、ラセミ体とメソ体の分離法の確立、単結晶エックス線構造解析による構造の確定、ラセミ体の光学分割、内包可能な分子の調査、内包分子に依存する物性の探索、キロプティカル特性の測定を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ナノカーボン研究分野の隆盛・重要性は、グラフェンのノーベル賞(2010年)、新学術領域研究「造形」「高密度共役」など多くのプロジェクトによって実証されているが、本研究課題『新規球状ナノカーボンの合理的設計と短工程合成法の開発』では、ナノカーボンの新たな物質群として、外周部も内部空間も合理的にデザイン可能な球状ナノカーボンの創成により、これまで有機分子デバイスで利用されているフラーレン誘導体が本目的分子に置き換わる、フラーレン化学の革命的な一歩となる可能性がある。

研究成果の概要(英文)：The synthesis of cage-like molecules consisting of covalent bonds, which are stronger than supramolecular interactions, was challenged. By using a bowl-shaped molecule with a wide π -conjugated system as a key starting material to form a face-to-face dimer, spherical nanocarbons were constructed in a bottom-up manner. The cage-like molecule was named c-cage. The c-cage was obtained as an approximately 1:1 mixture of racemic and meso forms depending on the position of the modification. In this study, we have so far established a synthetic method for the cage, established a separation method between the racemic and meso forms, determined the structure by single crystal X-ray structure analysis, carried out optical resolution of the racemic form, investigated the molecules that can be encapsulated, explored the physical properties that depend on the encapsulated molecules and measured their chiroptical properties.

研究分野：有機合成

キーワード：有機合成 ナノカーボン 曲面 共役系 ホストゲスト錯体 キロプティカル特性

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

ベンゼン環を縮環して組み上げた「ナノカーボン」材料は、優れた電子物性の起源となる sp^2 炭素のみで構成された化合物であり、 π 共役面内の超高速電荷移動度や鋼鉄を遙かに超える機械強度など、材料としてのポテンシャルは無機材料と比較しても桁違いに優れている。しかしながら現実的にトップダウン方式で得られるナノカーボン材料には多くの化学構造上の欠陥があり、またサイズ依存的性質からも単一の化合物として扱うことは難しい。一方、ボトムアップ合成で得られるナノカーボンは、構造が明確で一義的な性質を示す。

われわれは、二層グラフェンモデルとして 1,8-ナフタレン架橋コロネンの二種類の積層 2 量体回転異性体 (*syn* 体および *anti* 体) の合成に成功し、*syn* 体はグラフェン同様のスリップスタック構造を示し、一方 *anti* 体の結晶構造がこれまでのナノグラフェン積層にない新しい スタック

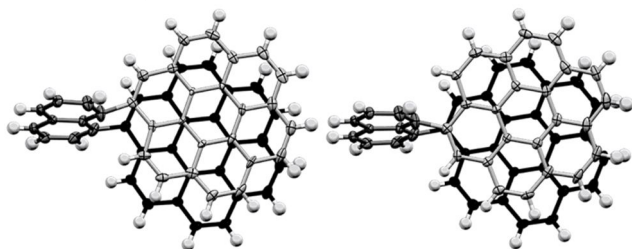


図 1 対面コロネン 2 量体の結晶構造(左 *syn* 体:右 *anti* 体)

をしていることを明らかにした (図 1: *ChemPhotoChem*, 2021, 5, 975-978. Top Downloaded Article)。 *anti* 体は重なり方によりラセミ体となっており、光学分割して円二色性スペクトル (CD) 及び円偏光発光スペクトル (CPL) を測定した。CD では分散型の鏡像スペクトル

が得られ、確かに光学分割できたことおよび励起子カップリング理論から絶対配置の決定に至った。さらに、結合を介さない二面の相互作用が強力なことから CPL の形状が Bisignate と分散型になり、発光についても励起子カップリングが見られ、*anti*-Kasha 発光という極めて珍しい現象を観測できた。これらはボトムアップ合成ならではの成果である。

優れた電子受容能をもつフラレンの n 型半導体特性は、トランジスタや太陽電池などのフレキシブル光起電力デバイス研究へ応用されている。一方で、例えば有機薄膜太陽電池では、フラレン骨格改変による物性調整の限界が示され、現在では非フラレン系アクセプター導入が世界的潮流となっている。無置換のフラレンはいずれも難溶性で、溶液プロセスによる成膜が大きく制限されるため、デバイス化のためには可溶性置換基の導入が行われるが、フラレン π 共役系とその高対称性は低下する。これは電子物性に大きく影響を及ぼし、また、分子間相互作用が小さくなるというジレンマを抱える。我々は、曲面をもつ分子性グラフェンを研究する過程で、曲面分子 2 つと架橋分子の縮環によって球状に共役系を構築できることを着想した。架橋ユニットの選択自由度がそのまま望みの電子物性をもつように設計できることに繋がり、発光特性や両極性など、従来フラレンがもたない機能をデバイスに必要な特性に合わせて合理的に設計できると考えた。

2. 研究の目的

代表的な有機電子受容体であるフラレンを含むドナー-アクセプター系はこれまで数多く構築され、様々な電子ドナー分子からフラレンへの光誘起電子移動過程が研究されてきた。しかし、フラレンの電子ドナー能力に関する研究は非常に限られている。Rh 触媒によるアリールボロン酸の C_{60} への付加反応を利用してフラレンより強い電子アクセプターであるキサンテン色素を C_{60} に直接結合した (図 2)。得られた連結化合物 $X60_NTf_2$ のフラレンを光励起した

際の蛍光消光および過渡吸収測定により、 C_{60} からキサンテン色素へ電子移動することを確認し C_{60} カチオンを発生するモデル化合物の構築に成功した (*Eur. J. Org. Chem.*, **2021**, 3377)。本研究結果は、フラーレンを電子ドナーとして、金属イオンの補助なしに分子内電荷分離した初めての例である。 $X_{60}\text{-NTf}_2$ は電子アクセプターとしての利用がほとんどであったフラーレンの、電子ドナーとしての応用の可能性を広げた。

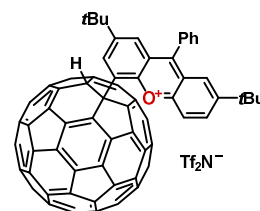


図2 $X_{60}\text{-NTf}_2$ の構造

さらに、 C_{70} へのキサンテン二重付加反応によるキラルフラーレンの合成とキロプティカル物性の開拓にも成功した。フラーレン C_{70} の二つの二重結合に置換基を付加して生成するキラルフラーレンは、ユニークな構造のためにキラル有機光学材料として非常に魅力的である。しかし、フラーレンの光学特性、特に蛍光は量子収率も小さく電子移動によって容易に消光するため、分子デバイス特性としてこれまで注目されてこなかった。本研究では、Rh 触媒によるビスホウ素化キサンテンの C_{70}

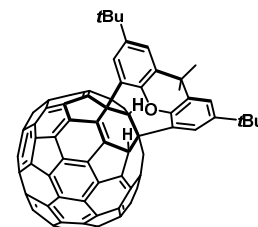


図3 X_{70A} の構造

への二重付加反応によってキラル C_{70} 誘導体 X_{70A} を合成した (図3)。さらに、 X_{70A} の光学分割にも成功し、700 nm まで伸びる対称形の CD スペクトルを得た (図4)。また、 X_{70A} は深赤色から近赤外領域で C_{70} よりも強い蛍光

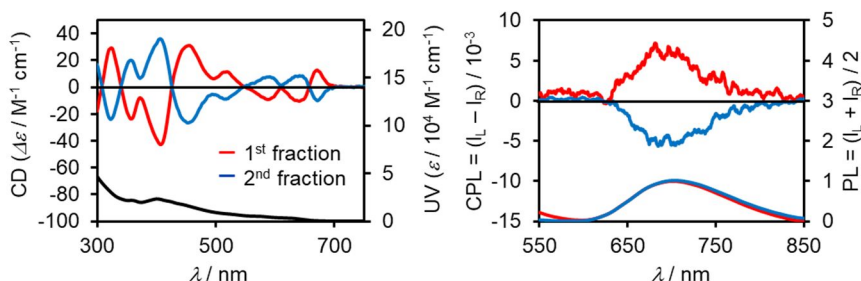


図4 キラル X_{70A} の CD スペクトル(左)および CPL スペクトル(右)

を示し、それぞれのエナンチオマーで鏡像の CPL が観測できた。CPL の異方性因子 g 値は 690 nm で $\pm 7.0 \times 10^{-3}$ であり、純粋な有機化合物かつ深赤領域としては大きな値であった (*Sci. Rep.*, **2021**, *11*, 12072)。n 型半導体としての利用がほとんどであったフラーレンに、電子ドナー性や発光材料として価値を見出したことは、長年研究されてきたフラーレンに注目されてこなかった視点である。これまでフラーレンの光化学は主に光励起後の電子移動と三重項エネルギー移動、例えば一重項酸素の生成に焦点が当てられてきた。今回の成果は、フラーレンの発光 (蛍光) がフォトニックデバイス材料へ応用できる可能性を示している。

ナノカーボン研究分野の隆盛・重要性は、グラフェンのノーベル賞 (2010 年)、新学術領域研究「 π 空間」「 π 造形」「高密度共役」など多くのプロジェクトによって実証されているが、本研究課題『新規球状ナノカーボンの合理的設計と短工程合成法の開発』では、ナノカーボンの新たな物質群として、外周部も内部空間も合理的にデザイン可能な球状ナノカーボン (Suprarenene と命名) の創成を目的とする。これまで有機分子デバイスで利用されているフラーレン誘導体为本目的分子に置き換わる、フラーレン化学の革命的な一歩を目指す。まずボウル型分子を出発物質として、100 個の π 電子を球状に配置する分子設計・合成戦略を確立する。

これまでのフラーレンの全合成は、L. Scott (米国) らによる合成最終段階で瞬間真空熱分解法 (Flash Vacuum Pyrolysis: FVP) を利用する方法のみである。この場合は分子骨格が高温に耐える必要があり、大量合成に不向きであるが、本研究では FVP を用いず有機合成化学的にデザイン可能な共役球状分子を合成する。有機合成による段階的フラーレン合成では、架橋ユニットを目的に合わせて合理的に調整することで、従来のフラーレンにはない新しい機能をもたせることが可能である。

3. 研究の方法

本研究に先立ち、armchair 型カーボンナノチューブの部分構造として 1,8 位直接結合型環状ピレン多量体 (CP n) の合成および各環サイズにおける特性について評価した。これまでに、環サイズによって異なる機能を示す環状分子の報告はほとんどない。ここでは 1,8-ジプロモピレンの Ni(cod)₂ を用いたカップリング反応により、一連の CP n を合成した。環状 3 量体は高度に歪んだ構造であり、近接化によるピレン間の強力な電子的相互作用のため、全ピレン系発光団の中で最も長波長である 599 nm のオレンジ色発光を示した。また、室内光下で酸素挿入反応が進行した。環状 4 量体はフラレンをゲスト分子として取り込み、ゲスト分子の形状によって異なるパッキング構造を示した。環状 5 量体は不斉ねじれの立体配座をとっており、光学分割に成功した異性体の CD および CPL のシグナルを観測した。

本研究では、Krische らのかご状分子の合成法 (JACS 2018) を参考に、Ni(cod)₂ によるホモカップリングにより、5 本のピフェニルユニットで架橋したかご型二量体 c-cage の合成に成功した。本研究ではここからさらに、架橋ユニットのベンゼン環とコラニユレンを縮環する反応条件を探索し、100 個の sp² 炭素で骨格形成する表面全体が電子相関した初めての球状ナノカーボン Suprarene を完成させるルートを考案した。反応性の高い出発物質とすることで、縮環反応は FVP を用いず有機合成化学的に可能となると考えた。置換基の導入方法が限られる C₆₀ と異なり、分子修飾が容易であることから、架橋ユニットとして電子豊富なチオフェンを導入して、正孔・電子双方の移動度の高い両極性や、ピラジンを導入してより強力な n 型半導体性能を発現するなど、合理的に優れた半導体特性に基づく電子材料を開発する。また、架橋分子を伸長して、内部空間の大きな分子の合成にも挑戦する。フラレンへの金属原子やガス分子の内包は、その発見当初からこれまで多数行われてきた。本研究では、C₆₀ や C₇₀ に内包されない大きなサイズの分子の導入が可能になるため、大気化では不安定な化学種をケージ内で発生させ、単離を試みる。また逆に、内包分子により Suprarene の性質や機能を制御でき、蛍光色素の内包により FRET を活用した発光材料等への利用も期待できる。さらに従来キラルフラレンとは異なり、Suprarene は内包分子によってキラリティを制御できるため、遅延蛍光や FRET を組み合わせて発光性能を上げることで 3D ディスプレイに応用可能な円偏光発光 (CPL) などのキロプティカルな性質が利用できる。研究代表者が研究実施全般を担う。

4. 研究成果

ゲスト分子の取り込み可能なサイズの内部空間をもつケージ状分子を合成する戦略として、通常は合成の容易さから超分子法や金属配位が用いられることが多い。しかしながら可逆的な弱い相互作用を用いて構築するケージ状化合物は溶媒などの外部環境によっては安定性を保つことが難しい。

本研究では超分子的相互作用より強固である共有結合からなるケージ状分子の合成に挑戦した。広い 共役系を有するお椀型分子を鍵出発物質として対面型二量体にする事で、ボトムアップ的に球形ナノカーボン短工程で構築し、分子設計自由度の高いケージ状分子を合成できた。本ケージ状分子を c-cage と名付けた。c-cage は修飾位置の違いによるラセミ体とメソ体が約 1:1 の混合物として得られた。本研究ではこれまでに、ケージの合成法の確立、ラセミ体とメソ体の分離法の確立、単結晶エックス線構造解析による構造の確定、ラセミ体の光学分割、内包

可能な分子の調査, 内包分子に依存する物性の探索, キロプティカル特性の測定を行った (論文準備中)。共有結合によって構築したケージ状化合物は化学的に安定であるため, 内包分子の化学変換やケージそのものの誘導体化が期待できる。また, 熱分析から高温でケージ分子が分解するまでゲスト分子はケージ中に保たれることがわかった。内部に取り込まれた分子はバルクの状態とは異なり孤立した (自己同士の相互作用のない) 状態にあるため, 今後赤外分光測定などで結合の状態の解析をする。さらに, P 体 M 体を光学分割したエナンチオピュアな c-cage の円偏光発光 (CPL) などのキロプティカル物性を検討した。有機物としては比較的大きな異方性因子 g 値が得られた。

共有結合によって構築したケージ状化合物は超分子ケージと比べて化学的に安定であるため, 内包分子の化学変換やケージそのものの誘導体化に好適である。これまでに誘導体のホモカップリングにより, ケージ状分子を合成し, 反応条件を詳細に検討することで単離収率が最高 17% まで改善された。生成物はラセミ体とメソ体の混合物となり, ケージ内には反応に用いた溶媒分子がゲスト分子として取り込まれる。現在までに, 9 種類のゲスト分子の導入に成功し, それぞれのラセミ体とメソ体の分離およびラセミ体の光学分割に成功した。各種物性測定を行った結果, 興味深いことに包接分子の物性はゲスト分子にほとんど依存しないことがわかった。さらに熱分析の結果, 本ケージ状分子は高温でもゲスト分子が逃れられない, 完全に閉じ込めるホスト分子であり, カルセランドの一種であることがわかった。

ケージ中に蛍光分子を内包することで発光分子となる可能性がある。また, 本ケージ状化合物はキラルになり, 蛍光発光体としての利用と合わせて, 円偏光発光 (CPL) などのキロプティカルな性質が期待できる。現在のところ, 発光量子収率が高くケージ内に導入できるサイズの蛍光分子を含んだ包接化合物の合成には成功していない。また, ケージ内部に熱や光など外部刺激によって反応する分子を導入し, ケージ内で有機反応する (分子フラスコとしての利用) ことにも今後挑戦する。

蛍光分子の導入や分子フラスコとしての利用の難しさは, ケージの内部空間が小さいためにゲスト分子の大きさの許容範囲が狭いこと, 反応温度が高くゲスト分子自体の分解や, ゲスト分子による反応への阻害などが考えられるため, 引き続き反応条件の最適化や架橋ユニットの伸長を検討する。

このように, 合成, 反応性, 電子的特徴を深く理解することで, ユニークな構造と物性を有する一連のケージ状化合物の合成・評価に成功した。引き続き縮環反応の探索を検討する。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計26件（うち査読付論文 26件 / うち国際共著 14件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Fujita Ryuichi, Yoshida Shoko, Kano Haruka, Matsuo Kyohei, Hayashi Hironobu, Yamada Hiroko, Aratani Naoki	4. 巻 41
2. 論文標題 A Series of Soluble Planar Oligorylenes up to Hexarylene	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chinese Journal of Chemistry	6. 最初と最後の頁 1023 ~ 1027
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cjoc.202200692	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, Morimoto Hirofumi, Matsuo Kyohei, Hayashi Hironobu, Yamada Hiroko, Aratani Naoki	4. 巻 29
2. 論文標題 An Atropisomerism Study of Large Cycloarylenes: [n]Cyclo 4,10 Pyrenylenes' Case	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202203848
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202203848	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 Lv Xiaojuan, Morimoto Hirofumi, Liu Ningchao, Kuzuhara Daiki, Aratani Naoki, Yamada Hiroko, Qiu Fengxian, Xue Songlin	4. 巻 88
2. 論文標題 Bent Dithienoporphyrin(2.1.2.1): Synthesis, Structure, Optical and Electronic Properties, and Metal Complexation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 3466 ~ 3473
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.2c02520	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 Meng, Deng Fangling, Xu Ling, Rao Yutao, Yin Bangshao, Zhou Mingbo, Kurosaki Ryo, Aratani Naoki, Osuka Atsuhiko, Song Jianxin	4. 巻 62
2. 論文標題 A Quadruply Bridged Non Offset Face to Face Porphyrin Dimer and Cross Shaped Pentameric Porphyrin Tapes Based on 2,7,12,17 Tetrakis(pinacolatoboryl) Ni(II) Porphyrin	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202300260
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202300260	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 Ge Xinrun, Rao Yutao, Xu Ling, Zhou Mingbo, Kurosaki Ryo, Aratani Naoki, Osuka Atsuhiko, Song Jianxin	4. 巻 8
2. 論文標題 Bottom-Up Synthesis of Multiply Fused Pd(II) Anthriporphyrinoids	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Central Science	6. 最初と最後の頁 1627 ~ 1632
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscentsci.2c01218	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 該当する

1. 著者名 Matsuo Kyohei, Okumura Rina, Hayashi Hironobu, Aratani Naoki, Jinnai Seihou, Ie Yutaka, Saeki Akinori, Yamada Hiroko	4. 巻 58
2. 論文標題 Phosphaacene as a structural analogue of thienoacenes for organic semiconductors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 13576 ~ 13579
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cc05122b	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 Zhang Zhongbo, Wang Zilong, Aratani Naoki, Zhu Xiaozhang, Zhang Qichun	4. 巻 4
2. 論文標題 Seeing Is Believing: A Wavy N-Heteroarene with 20 Six-Membered Rings Linearly Annulated in a Row	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 CCS Chemistry	6. 最初と最後の頁 3491 ~ 3496
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.31635/ccschem.022.202202013	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 該当する

1. 著者名 Ohtomo Manabu, Hayashi Hironobu, Shiotari Akitoshi, Kawamura Mayu, Hayashi Ryunosuke, Jippo Hideyuki, Yamaguchi Junichi, Ohfuchi Mari, Aratani Naoki, Sugimoto Yoshiaki, Yamada Hiroko, Sato Shintaro	4. 巻 4
2. 論文標題 On-surface synthesis of hydroxy-functionalized graphene nanoribbons through deprotection of methylenedioxy groups	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nanoscale Advances	6. 最初と最後の頁 4871 ~ 4879
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2na00031h	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 Chan Yee Seng, Hayashi Hironobu, Sato Shizuka, Kasahara Shoma, Matsuo Kyohei, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 2022
2. 論文標題 Polyazaacene and Cyclazaacene Precursors Synthesized by Dehydration Condensation from a Versatile Bis diketone Unit Having an Anthracene Skeleton	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 European Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 e202200621
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejoc.202200621	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 Liu Ningchao, Lv Xiaojuan, Xiao Bentian, Kuzuhara Daiki, Mei Peifeng, Aratani Naoki, Yamada Hiroko, Qiu Fengxian, Pan Jianming, Xue Songlin	4. 巻 51
2. 論文標題 A porphyrin(2.1.2.1) bis-boron complex as a deep-red AIE luminophore induced by intermolecular F- interaction	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 9606 ~ 9610
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2DT01289H	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 Liu Ningchao, Morimoto Hirofumi, Wu Fan, Lv Xiaojuan, Xiao Bentian, Kuzuhara Daiki, Pan Jianming, Qiu Fengxian, Aratani Naoki, Shen Zhen, Yamada Hiroko, Xue Songlin	4. 巻 24
2. 論文標題 Synthesis of Planar meso-Aryl Rosarins: A Reversible Antiaromatic/Aromatic Interconversion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 3609 ~ 3613
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.2c01147	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 Morimoto Hirofumi, Matsuo Kyohei, Hayashi Hironobu, Yamada Hiroko, Aratani Naoki	4. 巻 51
2. 論文標題 Facile Post-synthesis and Redox Behavior of -Expanded Ferrocene and ansa-Ferrocene	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 428 ~ 430
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.220011	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 Ningchao, Osterloh W. Ryan, Huang Hongliang, Tang Xinyue, Mei Peifeng, Kuzuhara Daiki, Fang Yuanyuan, Pan Jianming, Yamada Hiroko, Qiu Fengxian, Kadish Karl M., Xue Songlin	4. 巻 61
2. 論文標題 Synthesis, Characterization, and Electrochemistry of Copper Dibenzo porphyrin(2.1.2.1) Complexes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 3563 ~ 3572
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.1c03596	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 Lv Xiaojuan, Liu Ningchao, Xiao Bentian, Morimoto Hirofumi, Kuzuhara Daiki, Aratani Naoki, Yamada Hiroko, Qiu Fengxian, Xue Songlin	4. 巻 26
2. 論文標題 Synthesis of porphyrin(2.1.2.1) with embedded naphthalene	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Porphyrins and Phthalocyanines	6. 最初と最後の頁 510 ~ 516
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S1088424622500390	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 Yamauchi Mitsuaki, Okaji Miho, Aratani Naoki, Yamada Hiroko, Masuo Sadahiro	4. 巻 6
2. 論文標題 Reversible Photoluminescence Control of Azobenzene Crystals by Light and Heat Stimulation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ChemPhotoChem	6. 最初と最後の頁 e202100301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cptc.202100301	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 Lv Xiaojuan, Gao Hu, Wu Fan, Liu Ningchao, Ueno So, Yang Xiaoliang, Zhang Tao, Aratani Naoki, Yamada Hiroko, Qiu Fengxian, Shen Zhen, Xue Songlin	4. 巻 62
2. 論文標題 Highly Robust and Antiaromatic Rhenium(I) Rosarin	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 4747 ~ 4751
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.3c00061	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, Ryan Osterloh W., Lv Xiaojuan, Liu Ningchao, Gao Yimei, Lei Haitao, Fang Yuanyuan, Sun Zhongti, Mei Peifeng, Kuzuhara Daiki, Aratani Naoki, Yamada Hiroko, Cao Rui, Kadish Karl M., Qiu Fengxian	4. 巻 62
2. 論文標題 Enhanced Four Electron Oxygen Reduction Selectivity of Clamp Shaped Cobalt(II) Porphyrin(2.1.2.1) Complexes	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202218567
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202218567	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 Sugano Yuki, Matsuo Kyohei, Hayashi Hironobu, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 27
2. 論文標題 Synthesis and properties of 10,20-bis(triisopropylsilylethynyl)-tetrabenzo-5,15-diazaporphine	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Porphyrins and Phthalocyanines	6. 最初と最後の頁 136-144
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S1088424622500766	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, Lv Xiaojuan, Liu Ningchao, Morimoto Hirofumi, Xiao Bentian, Aratani Naoki, Kuzuhara Daiki, Yamada Hiroko, Qiu Fengxian	4. 巻 75
2. 論文標題 Porphyrin(2.1.2.1) rhenium(I) complexes: Synthesis, structures, properties, and dipyrin act as bipyridyl-like ligand	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Coordination Chemistry	6. 最初と最後の頁 2677 ~ 2691
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00958972.2022.2146498	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 Shi Yongqiang, Lin Yilin, Kang Fangyuan, Aratani Naoki, Huang Weiwei, Zhang Qichun	4. 巻 15
2. 論文標題 A Nitro-Rich Small-Molecule-Based Organic Cathode Material for Effective Rechargeable Lithium Batteries	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 1227 ~ 1233
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaami.2c18869	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 Jeong Eunjeong, Ito Tatsuya, Takahashi Kohtaro, Koganezawa Tomoyuki, Hayashi Hironobu, Aratani Naoki, Suzuki Mitsuharu, Yamada Hiroko	4. 巻 14
2. 論文標題 Exploration of Alkyl Group Effects on the Molecular Packing of 5,15-Disubstituted Tetrabenzoporphyrins toward Efficient Charge-Carrier Transport	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 32319 ~ 32329
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.2c07313	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 Wang Kaisheng, Rao Yutao, Xu Ling, Zhou Mingbo, Aratani Naoki, Osuka Atsuhiko, Song Jianxin	4. 巻 29
2. 論文標題 Post Installation of Fused Benzoheptagons at the Periphery of NiII Porphyrins: Helical Structures and Conformation Adjustable Fullerenes Binding	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 e202301955
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202301955	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 Miyazaki Kazuya, Matsuo Kyohei, Hayashi Hironobu, Yamauchi Mitsuaki, Aratani Naoki, Yamada Hiroko	4. 巻 25
2. 論文標題 An Unsymmetrical 5,15-Disubstituted Tetrabenzoporphyrin: Effect of Molecular Symmetry on the Packing Structure and Charge Transporting Property	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 7354 ~ 7358
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.3c02815	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, Morimoto Hirofumi, Okada Yuta, Matsuo Kyohei, Hayashi Hironobu, Saeki Akinori, Yamada Hiroko, Aratani Naoki	4. 巻 13
2. 論文標題 Complexation study of a 1,3-phenylene-bridged cyclic hexa-naphthalene with fullerenes C60 and C70 in solution and 1D-alignment of fullerenes in the crystals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 33459 ~ 33462
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d3ra06526j	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 Dong Yuting, Morimoto Hirofumi, Lv Xiaojuan, Mo Xuehuan, Chen Feng, Wu Fan, Aratani Naoki, Qiu Fengxian, Xue Songlin	4. 巻 89
2. 論文標題 Synthesis of Hybrid Porphyrin(2.1.2.1)s and Their Complexation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 1626 ~ 1632
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.3c02294	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 Kasahara Shoma, Ohtomo Manabu, Hayashi Ryunosuke, Fushimi Naoki, Yamaguchi Junichi, Matsuo Kyohei, Aratani Naoki, Sato Shintaro, Hayashi Hironobu, Yamada Hiroko	4. 巻 53
2. 論文標題 On-surface smooth polymerization of 5,11-bianthryl-anthradithiophene	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 upae036
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/chemle/upae036	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27件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 荒谷 直樹・加納 春華・山田 容子
2. 発表標題 コラニユレンに基づく球状ナノカーボンの創成
3. 学会等名 第5回動的エキシトン領域会議
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 荒谷 直樹・森本 裕詞・山田 容子
2. 発表標題 ジベンゾジメチルジヒドロピレンの新規合成法の開拓とフォトクロミック反応
3. 学会等名 2022年光化学討論会
4. 発表年 2022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 ジベンゾジヒドロピレンの新規合成法と光異性化
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 松尾恭平・奥村莉奈・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 有機電界効果トランジスタへの応用を志向したホスファアセンの合成
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 笠原彰真・林 宏暢・荒谷 直樹・山田 容子
2. 発表標題 可逆的ボロン酸エステル形成を利用した環状分子の合成：異性体の分離効果
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 南野直人・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との脱水縮合反応を用いた大環状分子の合成
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 Naoki Aratani, Keiji Uehara, Haruka Kano, Ryuichi Fujita, Shoko Yoshida, and Hiroko Yamada
2. 発表標題 Azulene-alternative Rylenes: Neutral and Non-radical Planar Pure Hydrocarbons with Near-infrared Absorption Beyond 1300 nm
3. 学会等名 The 19th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA19) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Kurosaki, H. Yamada, N. Aratani
2. 発表標題 A Directly-linked Cyclic Pyrene Tetramer as a Back-to-back Receptor for Two Fullerenes
3. 学会等名 The 19th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA19) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Morimoto, K. Matsuo, H. Yamada, N. Aratani
2. 発表標題 Photochromic behaviour and Global Aromaticity of Dibenzodihydropyrene
3. 学会等名 The 19th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA19) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Haruka Kano, Hiroko Yamada, Naoki Aratani
2. 発表標題 Novel Conjugative Covalent Molecular Cages Based on Corannulene
3. 学会等名 The 19th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA19) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Naoki Aratani, Keiji Uehara, Haruka Kano, Ryuichi Fujita, Shoko Yoshida, and Hiroko Yamada
2. 発表標題 Azulene-alternative Rylenes: Neutral and Non-radical Planar Pure Hydrocarbons with Near-infrared Absorption
3. 学会等名 25th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC25) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Kurosaki, M. Fujiki, H. Yamada, N. Aratani
2. 発表標題 Chiroptical properties of a twisted cyclopentapyrenylene
3. 学会等名 28th IUPAC Photochemistry (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Morimoto, K. Matsuo, H. Yamada, N. Aratani
2. 発表標題 Global aromaticity of photochromic dibenzodihydropyrene
3. 学会等名 28th IUPAC Photochemistry (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Kano, M. Fujiki, H. Yamada, N. Aratani
2. 発表標題 Synthesis and Chiroptical Properties of Corannulene Cages
3. 学会等名 28th IUPAC Photochemistry (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田 祥子・山田 容子・荒谷 直樹
2. 発表標題 骨格ゆがみの小さなヘキサリレンビスイミドの合成
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryo Kurosaki, Remi Metivier, Hiroko Yamada, and Naoki Aratani
2. 発表標題 Synthesis and photophysical properties of chiral 1,7-7',1'-cyclopyrenylene oligomers
3. 学会等名 日本化学会 第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryo Kurosaki, Hiroko Yamada, Naoki Aratani
2. 発表標題 Unique Properties of 1,8-Cyclic Pyrene Oligomers
3. 学会等名 NanoSynergetics2 Workshop (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 笠倉望路・吉田祥子・山田容子・荒谷直樹
2. 発表標題 近赤外吸収オリゴリレンビスイミドの合成研究
3. 学会等名 第33回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2023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 拡張ジベンゾジヒドロピレンの合成と光学特性
3. 学会等名 第33回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 林 宏暢・川村 真由・荒谷 直樹・大伴 真名歩・佐藤 信太郎、山田 容子
2. 発表標題 エッジ修飾グラフェンナノリボンの表面化学合成
3. 学会等名 第33回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮崎和哉・松尾恭平・荒谷直樹・山田容子
2. 発表標題 非対称型メゾ置換テトラベンゾポルフィリン誘導体の合成と電荷輸送特性
3. 学会等名 第33回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山内 光陽・中西 秀徳・荒谷 直樹・山田 容子
2. 発表標題 光と熱刺激によるアントラセン超分子多形の制御
3. 学会等名 2023年光化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮崎 和哉・松尾 恭平・水畑 吉行・荒谷 直樹・山田 容子
2. 発表標題 非対称型メゾ置換テトラベンゾポルフィリンの結晶構造と電荷輸送特性
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Haruka Kano, Kosaku Kato, Akira Yamakata, Hiroko Yamada, Naoki Aratani
2. 発表標題 Buckyball as an Electron Donor in a C60-Xanthene Dye Dyad
3. 学会等名 Curo-pi5 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 N. Aratani, H. Morimoto, K. Matsuo, H. Yamada
2. 発表標題 Novel Synthetic Method and Photochromic Reactions of Dibenzodimethyldihydropyrenes
3. 学会等名 ISOP2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 M. Yamauchi, H. Nakanishi, N. Aratani, H. Yamada
2. 発表標題 Control of anthracene supramolecular structures by photo and thermal stimulation
3. 学会等名 ISOP2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kazuya Miyazaki Kyohei Matsuo Naoki Aratani Hiroko Yamada
2. 発表標題 Synthesis and Charge Transport Properties of Unsymmetrical Meso-Substituted Tetrabenzoporphyrin Derivatives
3. 学会等名 Faraday Discussion (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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			
スイス	ETH Zurich			
フランス	ENS Paris-Saclay	University Paul Sabatier		
中国	Jiangsu University	Hunan Normal University		