様式 Z - 7

平成28年度科学研究費助成事業 実績報告書(研究実績報告書)

1. 機関番号

1	4	6	0	3
---	---	---	---	---

 2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学
3. 研究種目名 基盤研究(B)(一般) 4. 研究期間 平成26年度～平成28年度
5. 課題番号

2	6	2	8	8	0	3	8
---	---	---	---	---	---	---	---
6. 研究課題名 明確な構造をもつ分子性グラフェンを用いたモデル研究

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
6 0 3 7 2 5 6 2	アラタニ ナオキ 荒谷 直樹	物質創成科学研究科	准教授

8. 研究分担者

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名

9. 研究実績の概要

現在もっともホットな研究対象の一つであるグラフェンのモデル研究として、構造の明確な、分子として扱うことが可能な「ナノグラフェン」の科学を探究している。テトラベンゾペリペンタセンはsp²炭素56個からなる平面分子であるが、結晶中では天然には見られない型グラファイトの重なり方をしていた。溶液中でも平面が安定してスタックした状態を保つことができれば、分子性のグラファイト(ナノグラファイト)として、面間の相互作用や層間貫入化合物の合成や性質を調べることができる。そこで我々はそのプロトタイプとして、1,8-ナフタレン架橋によってペリレンを強制的に積層することに成功した。ペリレン層間の距離が、一般的な結晶中に見られるスタックよりも短く、グラファイト中の炭素シート間距離と同等であることを単結晶X線構造解析から明らかにした。2量体の電気化学測定から、第1酸化電位がペリレン単量体と比べて200 mV程度低くなっていることが明らかになり、安定なカチオンダイマーを形成していることが示唆された。

積層2量体の吸収スペクトルは単量体と比べて長波長シフトしており、その蛍光は狙い通りエキサイマー発光を示した。同じ手法で3量体まで合成に成功している。

リチウムイオン電池はグラファイト負極を用いており、炭素シート間に金属を挿入することは安定なレドックスの達成に繋がると予想される。そこで金属原子をサンドイッチした層間化合物の合成にも挑戦している。

10. キーワード

- (1) 有機半導体 (2) グラフェン (3) 分子デバイス (4) アセン
 (5) _____ (6) _____ (7) _____ (8) _____

(注)・印刷に当たっては、A4判(縦長)・両面印刷すること。

(1/14)

11. 現在までの進捗状況

(区分)

(理由)

28年度が最終年度であるため、記入しない。

12. 今後の研究の推進方策 等

(今後の推進方策)

28年度が最終年度であるため、記入しない。

(次年度使用額が生じた理由と使用計画)

(理由)

28年度が最終年度であるため、記入しない。

(使用計画)

28年度が最終年度であるため、記入しない。

13. 研究発表 (平成 28 年度の研究成果)

〔雑誌論文〕 計 (15) 件 / うち査読付論文 計 (15) 件 / うち国際共著論文 計 (5) 件 / うちオープンアクセス 計 (1) 件

著者名		論文標題				
Y. Rao, J. O. Kim, W. Kim, G. Zhong, B. Yin, M. Zhou, H. Shinokubo, N. Aratani, T. Tanaka, S. Liu, A. Osuka, D. Kim, J. Song		-to- 2,5-Pyrrolylene-Linked Cyclic Porphyrin Oligomers				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Chem. Eur. J.	有	52	2 0 1 6	8801-8804	該当する	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1002/chem.201601306						
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						

著者名		論文標題				
J. Zhang, P. Gu, G. Long, R. Ganguly, Y. Li, N. Aratani, H. Yamada, Q. Zhang		Switching charge-transfer characteristics from p-type to n-type through molecular "doping" (cocrystallization)				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Chem. Sci.	有	7	2 0 1 6	3851-3856	該当する	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1039/c5sc04954g						
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						

著者名		論文標題				
M. Yamashita, H. Hayashi, M. Suzuki, D. Kuzuhara, J. Yuasa, T. Kawai, N. Aratani, H. Yamada		Bisanthra-thianthrene: synthesis, structure and oxidation properties				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
RSC Adv.	有	6	2 0 1 6	70700-70703	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1039/c6ra13036d						
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						

著者名		論文標題				
D. Kuzuhara, W. Furukawa, A. Kitashiro, N. Aratani, H. Yamada		Synthesis and Metalation of Doubly o-Phenylene-Bridged Cyclic Bis(dipyrrin)s with Highly Bent Skeleton of Dibenzo porphyrin(2.1.2.1)				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Chem. Eur. J.	有	22	2016	10671-10678	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1002/chem.201601083						
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						

著者名		論文標題				
T. Okabe, D. Kuzuhara, M. Suzuki, N. Aratani, H. Yamada		Porphycene Dimer Based Non-Fullerene Acceptor for Organic Solar Cell				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
J. Porphyrins Phthalocyanines	有	20	2016	1350-1360	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1142/S1088424616501108						
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						

著者名		論文標題				
X. Yang, X. Shi, N. Aratani, T. P. Goncalves, K.-W. Huang, H. Yamada, C. Chi, Q. Miao		Benzo[4,5]cyclohepta[1,2-b]fluorene: an isomeric motif for pentacene containing linearly fused five-, six- and seven-membered rings				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Chem. Sci.	有	7	2016	6176-6181	該当する	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1039/c6sc01795a						
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						

著者名		論文標題				
A. Matsumoto, M. Suzuki, H. Hayashi, D. Kuzuhara, J. Yuasa, T. Kawai, N. Aratani, H. Yamada		Aromaticity Relocation in Perylene Derivatives upon Two-electron Oxidation to Form Anthracene and Phenanthrene				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Chem. Eur. J.	有	22	2 0 1 6	14462-14466	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1002/chem.201602188						
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						

著者名		論文標題				
Y. Tamura, D. Kuzuhara, M. Suzuki, H. Hayashi, N. Aratani, H. Yamada		Fullerene-linked tetrabenzoporphyrins for solution-processed organic photovoltaics: flexible vs. rigid linkers				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
J. Mater. Chem. A	有	4	2 0 1 6	15333-15342	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1039/c6ta06599f						
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						

著者名		論文標題				
S. Xue, D. Kuzuhara, N. Aratani, H. Yamada		Synthesis and Characterization of an Iridium Triphyrin Complex				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Inorg. Chem.	有	55	2 0 1 6	10106-10109	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1021/acs.inorgchem.6b01841						
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						

著者名		論文標題				
W. Zeng, H. Phan, T. S. Herng, T. Y. Gopalakrishna, N. Aratani, Z. Zeng, H. Yamada, J. Ding, J. Wu		Rylene Ribbons with Unusual Diradical Character				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Chem	有	2	2 0 1 7	81-92	該当する	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1016/j.chempr.2016.12.001						
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						

著者名		論文標題				
K. Kawajiri, T. Kawanoue, M. Yamato, K. Terai, M. Yamashita, M. Furukawa, N. Aratani, M. Suzuki, K.-i. Nakayama, H. Yamada		Fullerene-Based n-Type Materials That Can Be Processed by a Photoprecursor Approach for Photovoltaic Applications				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
ECS J. Solid State Sci. Technol.	有	6	2 0 1 7	M3068-M3074	-	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1149/2.0141706jss						
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)						

著者名		論文標題				
K. Takahashi, B. Shan, X. Xu, S. Yang, T. Koganezawa, D. Kuzuhara, N. Aratani, M. Suzuki, Q. Miao, H. Yamada		Engineering Thin Films of a Tetrabenzoporphyrin toward Efficient Charge-Carrier Transport: Selective Formation of a Brickwork Motif				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
ACS Appl. Mater. Interfaces	有	9	2 0 1 7	8211-8218	該当する	
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1021/acsami.6b13988						
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						

著者名	論文標題【掲載確定】				
H. Hayashi, N. Aratani, H. Yamada	Semiconducting Self-assembled Nanofibers Prepared from Photostable Octafluorinated Bisanthene Derivatives				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Chem. Eur. J.	有	23	2 0 1 7	in press	-
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
10.1002/chem.201700080					
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					

著者名	論文標題【掲載確定】				
A. Matsumoto, M. Suzuki, H. Hayashi, D. Kuzuhara, J. Yuasa, T. Kawai, N. Aratani, H. Yamada	Studies on Pyrene and Perylene Derivatives upon Oxidation and Application to a Higher Analogue				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Bull. Chem. Soc. Jpn	有	90	2 0 1 7	in press	-
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
10.1246/bcsj.20160337					
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					

著者名	論文標題【掲載確定】				
M. Kojima, A. Tamoto, N. Aratani, H. Yamada	Rearrangement of an aniline linked perylene bisimide under acidic conditions and visible to near-infrared emission from intramolecular charge-transfer state of its fused derivatives				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Chem. Commun.	有	53	2 0 1 7	in press	-
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
10.1039/C7CC01520H					
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					

〔学会発表〕 計(20)件/うち招待講演 計(4)件/うち国際学会 計(8)件

発表者名		発表標題	
松本彬伸、荒谷直樹、山田容子		拡張したペリレンビスイミド誘導体の合成と物性	
学会等名		発表年月日	発表場所
第27回 基礎有機化学討論会		2016年09月01日 ~ 2016年09月03日	広島国際会議場(広島県広島市)

発表者名		発表標題	
山下正真、荒谷直樹、山田容子		ナフタレン縮環TTF bisimideの合成とそのラジカルカチオンの性質	
学会等名		発表年月日	発表場所
第27回 基礎有機化学討論会		2016年09月01日 ~ 2016年09月03日	広島国際会議場(広島県広島市)

発表者名		発表標題	
田本彬、荒谷直樹、Briseno Alejandro、山田容子		ノナベンソコロネンの結晶構造とデバイス性能	
学会等名		発表年月日	発表場所
第27回 基礎有機化学討論会		2016年09月01日 ~ 2016年09月03日	広島国際会議場(広島県広島市)

発表者名		発表標題	
薛 松林・葛原・大軌・荒谷直樹・山田容子		湾曲構造を有するヘキサフィリン(2.1.2.1.2.1)とポルフィリン(2.1.2.1)とその金属錯体の合成	
学会等名		発表年月日	発表場所
第27回 基礎有機化学討論会		2016年09月01日 ~ 2016年09月03日	広島国際会議場(広島県広島市)

発表者名	発表標 題	
荒谷直樹、村山智寿、松本彬伸、田本彬、山田容子	分子性グラファイトを志向した対面型ペリレン多量体の構築	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
第27回 基礎有機化学討論会	2016年09月01日 ~ 2016年09月03日	広島国際会議場 (広島県広島市)

発表者名	発表標 題	
Murayama Tomohisa, Naoki Aratani, Hiroko Yamada	Photophysical Properties of Face-to-face Perylene Dimer and Trimer	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
2016年光化学討論会	2016年09月06日 ~ 2016年09月08日	東京大学駒場第一キャンパス (東京都目黒区)

発表者名	発表標 題	
葛原 大軌、薛 松林、荒谷 直樹、山田 容子	エチレン架橋拡張ポルフィリン類の合成	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
日本化学会第97春季年会	2017年03月16日 ~ 2017年03月19日	慶應義塾大学理工学部 (神奈川県横浜市)

発表者名	発表標 題	
村山 智寿・荒谷 直樹・山田 容子	二重1,8-ナフチレン架橋対面型ペリレン2量体の合成	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
日本化学会第97春季年会	2017年03月16日 ~ 2017年03月19日	慶應義塾大学理工学部 (神奈川県横浜市)

発表者名	発表標 題	
IKEDA, Erika; ARATANI, Naoki; YAMADA, Hirorko	Synthesis of an N-doped nanographene	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
日本化学会第97春季年会	2017年03月16日 ~ 2017年03月19日	慶應義塾大学工学部 (神奈川県横浜市)

発表者名	発表標 題	
田中 智士・荒谷 直樹・山田 容子	ベンゾジサルチンを利用した高次アセンの合成法の開拓	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
日本化学会第97春季年会	2017年03月16日 ~ 2017年03月19日	慶應義塾大学工学部 (神奈川県横浜市)

発表者名	発表標 題	
FURUKAWA, Wataru; KUZUHARA, Daiki; ARATANI, Naoki; YAMADA, Hiroko	Synthesis of Macrocyclic Molecules with Twisted Porphyrins(2.1.2.1)	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
日本化学会第97春季年会	2017年03月16日 ~ 2017年03月19日	慶應義塾大学工学部 (神奈川県横浜市)

発表者名	発表標 題	
Mitsuharu Suzuki, Kengo Terai, Naoki Aratani, Hiroko Yamada	Substituent Impact on the Open-Circuit Voltage in Organic Solar Cells Prepared through a Photoprecursor Approach	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
日本化学会第97春季年会	2017年03月16日 ~ 2017年03月19日	慶應義塾大学工学部 (神奈川県横浜市)

発表者名	発表標 題	
Wataru Furukawa, Daiki Kuzuhara, Naoki Aratani, Hiroko Yamada	Synthesis of Highly Bent Porphyrins(2.1.2.1) and Their Metal Complexes	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
26th IUPAC International Symposium on Photochemistry (国際学会)	2016年04月03日 ~ 2016年04月08日	Osaka, Japan

発表者名	発表標 題	
Hiroko Yamada, Daiki Kuzuhara, Shinsuke Kawatsu, Songlin Xue, Naoki Aratani	Synthesis of Oxatriphyrin(2.1.1) and its Boron Complex	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
Ninth international conference on porphyrins and phthalocyanines (ICPP-9) (招待講演) (国際学会)	2016年07月03日 ~ 2016年07月08日	Nanjing, China

発表者名	発表標 題	
Takuya Okabe, Daiki Kuzuhara, Naoki Aratani, Hiroko Yamada	Synthesis of Non-planar Dimers for New n-type Organic Semiconductors	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
Ninth international conference on porphyrins and phthalocyanines (ICPP-9) (国際学会)	2016年07月03日 ~ 2016年07月08日	Nanjing, China

発表者名	発表標 題	
Daiki Kuzuhara, Wataru Furukawa, Naoki Aratani, Hiroko Yamada	Dibenzoporphyrin(2.1.2.1):Highly Bent o-Phenylene Bridged Bisdipyrin	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
Ninth international conference on porphyrins and phthalocyanines (ICPP-9) (招待講演) (国際学会)	2016年07月03日 ~ 2016年07月08日	Nanjing, China

発表者名	発表標 題	
Daiki Kuzuhara, Takuya Okabe, Mika Sakaguchi, Naoki Aratani, Hiroko Yamada	Functionalized Porphycenes for Organic Electronics	
学 会 等 名	発表年月日	発表場 所
Ninth international conference on porphyrins and phthalicyanines (ICPP-9) (招待講演) (国際学会)	2016年07月03日 ~ 2016年07月08日	Nanjing, China

発表者名	発表標 題	
Naoki Aratani, Akinobu Matsumoto, Akira Tamoto, Tomohisa Murayama, and Hiroko Yamada	From Nanographene to Molecular Graphite-Development of Pyrene and Perylene-based Large π -Conjugated Systems	
学 会 等 名	発表年月日	発表場 所
9th Singapore International Chemistry Conference (招待講演) (国際学会)	2016年12月11日 ~ 2016年12月14日	NUS University Town, Singapore

発表者名	発表標 題	
Akinobu Matsumoto, Mitsuharu Suzuki, Daiki Kuzuhara, Hironobu Hayashi, Naoki Aratani, and Hiroko Yamada	Synthesis of a 56 All-Carbon Conjugated Tetrabenzoperipentacene	
学 会 等 名	発表年月日	発表場 所
9th Singapore International Chemistry Conference (国際学会)	2016年12月11日 ~ 2016年12月14日	NUS University Town, Singapore

発表者名	発表標 題	
A. Tamoto, N. Aratani, A. Briseno, H. Yamada	The structure and property of nonabenzocoronene for organic electronics	
学 会 等 名	発表年月日	発表場 所
9th Singapore International Chemistry Conference (国際学会)	2016年12月11日 ~ 2016年12月14日	NUS University Town, Singapore

〔図書〕 計(0)件

著者名	出版社		
書名	発行年	総ページ数	

14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出願〕 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

〔取得〕 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

15. 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

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

16. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

(1) 国際共同研究 : 国際共同研究である

共同研究相手国	相手方研究機関			
Singapore	National University of Singapore	Nanyang Technplogical University	-	-
Korea	Yonsei University	-	-	-
Spain	Autanoma University of Madrid	-	-	-
-	-	-	-	-
-	-	-	-	-
-				

17. 備考

奈良先端科学技術大学院大学 有機光分子科学研究室
http://mswebs.naist.jp/LABs/env_photo_greenmat/