マテリアル先端リサーチインフラ利用報告書
ARIM User's Report

【Release：2025.07.24】　【Update：2025.07.23】

課題データ / Project Data

課題番号 Project Issue Number	22MS5004
利用課題名 Title	周期的3次元有機構造体の創製
利用した実施機関 Support Institute	自然科学研究機構 分子科学研究所 / IMS
機関外・機関内の利用 External or Internal Use	内部利用（ARIM事業参画者以外）/Internal Use (by non ARIM members)
ARIM半導体基盤PF 関連課題 Related to ARIM-SETI	指定なし / No Designation
横断技術領域 Cross-Technology Area	物質・材料合成プロセス/Molecule & Material Synthesis 計測・分析/Advanced Characterization
重要技術領域 Important Technology Area	マテリアルの高度循環のための技術/Advanced materials recycling technologies 高度なデバイス機能の発現を可能とするマテリアル/Materials allowing high-level device functions to be performed
キーワード Keywords	有機共有結合構造体,NMR,単結晶X線構造解析

利用者と利用形態 / User and Support Type

利用者名（課題申請者） User Name (Project Applicant)	瀬川 泰知
所属名 Affiliation	分子科学研究所 生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門（瀬川G）
共同利用者氏名 Names of Collaborators Excluding Supporters in the Hub and Spoke Institutes	杉山晴紀,長瀬真依,廣田宗士,渡邊幸佑,吉田瑠,中野さち子,平田直
ARIM実施機関支援担当者 Names of Supporters in the Hub and Spoke Institutes	
利用形態 Support Type	機器利用/Equipment Utilization

利用した主な設備 / Equipment Used in This Project

利用した主な設備 Equipment ID & Name	MS-210：オペランド多目的X線回析 MS-224：MALDI-TOF質量分析 MS-227：蛍光分光 MS-228：紫外・可視・近赤外分光光度計 MS-229：絶対PL量子収率測定装置

報告書データ / Report

概要（目的・用途・実施内容） Abstract (Aim, Use Applications and Contents)	共有結合が無限に周期的につながった有機共有結合構造体は、金属を含まないナノポーラス材料として近年注目されている。本研究では、剛直かつ電子輸送能をもつ有機共有結合構造体の構築を目指している。本年度は、有機共有結合構造体のユニットとなる新規π共役分子の合成および構造解析を行った。その際に、予期しない4員環生成反応が進行することを発見し、その条件の精査および反応機構の解析を行った。
実験 Experimental	正方形が互いに直交して組み上がる3次元幾何学図形はnboトポロジーと呼ばれる。これはcubic対称性をもつ3次元等方的な性質をもつ。このトポロジーを有機共有結合構造体に応用すると、現在広く用いられているdiaトポロジー（ダイヤモンド構造）と異なり、相互貫入構造を防ぐことができるという大きな利点をもつ。さらに、単結合で結ばれるdia構造と比較して、2本以上の結合でつながるスピロ縮環構造を用いることができるため、構造の剛直化が可能である。これらの点から、正方形分子を精密にデザインして有機共有結合構造体のユニットとすることが求められる。一方、典型元素は一般に平面において正三角形型（120°）であり、90°のユニットには大きなひずみが生じるために合成難易度が上がる。これを解決し、理想の物性をもつ正方形ユニットの合成を試みた。実験は有機合成化学的手法を用いて多段階の反応で合成し、得られた化合物はNMR、質量分析、X線結晶構造解析によって構造決定を行った。ユニットの光学的および電気化学的性質を調べるために、紫外可視吸収スペクトル測定、蛍光スペクトル測定、蛍光量子収率測定、サイクリックボルタンメトリー測定を行った。
結果と考察 Results and Discussion	ユニット合成段階において、正方形分子ではなく1つの部位が4員環になったC2対称分子が生成していることが、NMR、X線結晶構造解析より明らかになった。4員環は大きなひずみを有するため一般に生成困難であり、今回のように遷移金属を用いずに合成できることは非常に珍しい。サイクリックボルタンメトリーより、4員環のない参照化合物と比較して電子受容能が向上していることが明らかになった。
図・表・数式 Figures, Tables and Equations	
その他・特記事項（参考文献・謝辞等） Remarks(References and Acknowledgements)	

成果発表・成果利用 / Publication and Patents

DOI（論文・プロシーディング）[1] DOI (Publication and Proceedings)	Eiki Tomita, An Electron-Deficient Cp^E Iridium(III) Catalyst: Synthesis, Characterization, and Application to Ether-Directed C–H Amidation, *Angewandte Chemie International Edition*, **62**, (2023). DOI: 10.1002/anie.202301259
DOI（論文・プロシーディング）[2] DOI (Publication and Proceedings)	Kenya Tanaka, Polarized Raman spectroscopy on topological semimetal $Co_3Sn_2S_2$, *Journal of Raman Spectroscopy*, **54**, 93-100(2022). DOI: 10.1002/jrs.6459
口頭発表、ポスター発表および、その他の論文[1] Oral Presentations etc.	吉田瑠・杉山晴紀・瀬川泰知「Synthesis and property of bay-fluorinated triphenylenes」総研大冬の学校 2022年12月21日 ポスター

口頭発表、ポスター発表および、その他の論文[2] Oral Presentations etc.	廣田宗士・中野さち子・杉山晴紀・瀬川泰知「Unexpected 4-membered-ring formation in the carbonylation reaction of tetraphenylenes」総研大冬の学校 2022年12月21日 ポスター
口頭発表、ポスター発表および、その他の論文[3] Oral Presentations etc.	長瀬 真依・中野さち子・瀬川泰知「複数のチオフェン環が縮環した非平面π共役分子の合成と性質」日本化学会第103春季年会 2023年3月23日 口頭
特許出願件数 Number of Patent Applications	0件
特許登録件数 Number of Registered Patents	0件