

## 瀬川 泰知 (准教授) (2020年4月1日着任)

杉山 晴紀 (助教)  
渡邊 幸佑 (特別共同利用研究員)  
中野 さち子 (技術支援員)  
谷分 麻由子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：有機合成化学, 構造有機化学

A-2) 研究課題：

- a) 3次元幾何構造をもつ機能性有機構造体の合成と機能解明
- b) 分子の概念を拡張する新たな分子トポロジーの確立
- c) 電子回折結晶構造解析の有機機能性材料開発への活用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 湾曲構造をもつ $\pi$ 共役有機分子の合成と構造解析を行った。大環状に $\pi$ 共役が繋がった筒状芳香族炭化水素分子の合成およびその反応性の解明に成功した (学術論文リスト 2,6,7)。また, カーボンナノベルトの構造とひずみエネルギーの関係について, 量子化学計算によって新たな知見を得た (学術論文リスト 4)。
- b) カテナン, ロタキサン, 分子ノットといったトポジカルな分子構造の効率的合成法の検討を行っている。全てベンゼン環でできた分子であるシクロパラフェニレンを用いてカテナンを合成する技術をすでに開発しているが, 従来よりも小さいサイズである [9]シクロパラフェニレンを用いてカテナンを作ることに成功した。X線結晶構造解析によって構造決定し, カテナントポロジーを有する分子であることを確認した (学術論文リスト 5)。
- c) 湾曲した $\pi$ 共役分子が作る超分子ナノワイヤーの3次元構造が電子回折結晶構造解析によって解析することに成功した。密な二重らせん構造によって, 置換基のない縮環芳香族炭化水素が安定なナノワイヤーとして有機溶媒のゲル化剤として働くことを初めて見出した。電子回折がサブマイクロメートルオーダーの有機構造体の構造解析に対して絶大な威力を発揮することを明確に示した (学術論文リスト 1)。

B-1) 学術論文

**K. KATO, K. TAKABA, S. MAKI-YONEKURA, N. MITOMA, Y. NAKANISHI, T. NISHIHARA, T. HATAKEYAMA, T. KAWADA, Y. HIJIKATA, J. PIRILLO, L. T. SCOTT, K. YONEKURA, Y. SEGAWA and K. ITAMI**, “Double-Helix Supramolecular Nanofibers Assembled from Negatively Curved Nanographenes,” *J. Am. Chem. Soc. ASAP* **143**, 5465–5469 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c00863

**K. Y. CHEUNG, K. WATANABE, Y. SEGAWA and K. ITAMI**, “Synthesis of a Zigzag Carbon Nanobelt,” *Nat. Chem.* **13**, 255–259 (2021). DOI: 10.1038/s41557-020-00627-5

**B. RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ, T. NELSON, N. OLDANI, A. MARTÍNEZ-MESA, L. URANGA-PIÑA, Y. SEGAWA, S. TRETIAK, K. TAMI and S. FERNANDEZ-ALBERTI**, “Exciton Spatial Dynamics and Self-Trapping in Carbon Nanocages,” *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 224–231 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.0c03364

**K. WATANABE, Y. SEGAWA and K. ITAMI**, “A Theoretical Study on the Strain Energy of Helicene-Containing Carbon Nanobelts,” *Chem. Commun.* **56**, 15044–15047 (2020). DOI: 10.1039/D0CC06373H

**S. MATSUBARA, Y. KOGA, Y. SEGAWA, K. MURAKAMI and K. ITAMI**, “Creation of Negatively Curved Polyaromatics Enabled by Annulative Coupling that Forms an Eight-Membered Ring,” *Nat. Catal.* **3**, 710–718 (2020). DOI: 10.1038/s41929-020-0487-0

**Y. LI, Y. SEGAWA, A. YAGI and K. ITAMI**, “A Nonalternant Aromatic Belt: Methylene-Bridged [6]Cycloparaphenylene Synthesized from Pillar[6]arene,” *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 12850–12856 (2020). DOI: 10.1021/jacs.0c06007

**H. SHUDO, M. KUWAYAMA, Y. SEGAWA and K. ITAMI**, “Synthesis of Cycloptycenes from Carbon Nanobelt,” *Chem. Sci.* **11**, 6775–6779 (2020). DOI: 10.1039/D0SC02501A

**M. NAGASE, K. KATO, A. YAGI, Y. SEGAWA and K. ITAMI**, “Six-Fold C–H Borylation of Hexa-*peri*-hexabenzocoronene,” *Beilstein J. Org. Chem.* **16**, 391–397 (2020). DOI: 10.3762/bjoc.16.37

**Y. SAITO, K. YAMANOUE, Y. SEGAWA and K. ITAMI**, “Selective Transformation of Strychnine and 1,2-Disubstituted Benzenes by C–H Borylation,” *Chem* **6**, 985–993 (2020). DOI: 10.1016/j.chempr.2020.02.004

**Y. SEGAWA, M. KUWAYAMA and K. ITAMI**, “Synthesis and Structure of [9]Cycloparaphenylene Catenane: An All-Benzene Catenane Consisting of Small Rings,” *Org. Lett.* **22**, 1067–1070 (2020). DOI: 10.1021/acs.orglett.9b04599

B-3) 総説, 著書

**K. Y. CHEUNG, Y. SEGAWA and K. ITAMI** “Synthetic Strategies of Carbon Nanobelts and Related Belt-Shaped Polycyclic Aromatic Hydrocarbons,” *Chem. –Eur. J.* **26**, 14791–14801 (2020). DOI: 10.1002/chem.202002316

B-4) 招待講演

瀬川泰知, 「MicroED 構造有機化学」, 第一回バーチャル化学フロンティア研究会, オンライン開催, 2020年5月.

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎錯体化学」, 2020年7月14日–20日.

B-10) 競争的資金

旭硝子財団研究助成, 「微小結晶の構造解析を基軸とする3次元有機共有結合ネットワークの開発」, 瀬川泰知 (2020年度–2021年度).

大幸財団自然科学系学術研究助成, 「革新的構造解析手法に基づく有機半導体材料の開発」, 瀬川泰知 (2020年度–2021年度).

豊秋奨学会研究費助成, 「ナノ構造制御を鍵とする有機超分子繊維材料の開発」, 瀬川泰知 (2020年度–2021年度).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「新たな機械的結合の提唱と展開」, 瀬川泰知 (2019年度–2020年度).

科研費基盤研究(B), 「トポロジカル $\pi$ 共役化学の開拓」, 瀬川泰知 (2019年度–2021年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 関東化学(株), 「ゲル化能をもつ湾曲芳香族炭化水素」, 瀬川泰知 (2020年).

C) 研究活動の課題と展望

2020年度は研究グループの立ち上げを行った。新型コロナウイルス感染症の影響で研究室工事が遅延したが、9月より有機合成実験を始めることができた。3次元的な分子設計による特異なトポロジーをもった有機構造体の創製に向けて、本年度は湾曲芳香族炭化水素に関する研究論文の発表を行った。特に、ゲル化能を示す湾曲芳香族炭化水素のナノワイヤー構造を電子回折構造解析で決定したことで、これまで構造決定不可能であったサブマイクロメートルオーダーの有機構造体の合成化学を、電子回折という新たな武器によって強力で推進できることを示した。今後は新たなトポロジーをもつ有機分子や3次元ネットワーク高分子の合成を行い、既存の有機合成の限界を突破した物質創製研究を遂行していく。