

戦略的創造研究推進事業 CREST  
研究領域「プロセスインテグレーションに向けた高  
機能ナノ構造体の創出」  
研究課題「ソフトπマテリアルの創製と機能発  
現」

## 研究終了報告書

研究期間 平成22年12月～平成28年 3月

研究代表者：山口茂弘  
(名古屋大学 トランスフォーメティブ  
生命分子研究所、教授)

## § 1 研究実施の概要

### (1) 実施概要

本研究は、次世代の有機エレクトロニクス技術の発展の礎となりうる優れた  $\pi$  共役骨格の創出とその凝集構造の制御により、特異な物性や機能を実現することを目的として実施された。「典型元素」の導入による電子構造の修飾と、「高度に拡張された  $\pi$  骨格」の創出の 2 つの切り口により独創性に富んだ骨格を創出し、さらには、凝集状態での分子配向制御を可能にする設計指針の提案と、その固体構造や動的挙動に由来した特異な物性、機能発現の追究に取り組んだ。その主な成果は以下のようにまとめられる。

まず、1) 典型元素の導入による新骨格の創出を目指し、B や P を組み込んだ新規な  $\pi$  共役系の合成に取り組んだ。一連の縮合多環式  $\pi$  電子系を合成し、これらの元素を含む 5 員環骨格が電子受容性骨格として有用なことを示した。また、カルボカチオンの典型的な反応の一つである Nazarov 環化のホウ素版反応が光照射下で進行することを発見し、ホウ素  $\pi$  電子系のフォトクロミック特性を顕在化させた。2) ホウ素を含む一連の平面  $\pi$  電子系の合成を達成した。この成果の基礎となったのが「平面固定による構造強化」による安定化という考え方であり、有機ホウ素材料の安定化には立体保護による速度論的安定化が必須という従来の常識を覆す結果である。得られた化合物の有機 EL 素子や液晶などへの応用を検討するとともに、ホウ素ドーピンググラフェンのモデルとも捉えられる全て  $sp^2$  炭素で拡張した平面ホウ素  $\pi$  電子系の合成も達成した。両極性電荷輸送性やリチウム電池の電極材料としての潜在性に加え、ホウ素中心のルイス酸性に由来した化学吸着能、ルイス酸塩基錯体の光解離挙動など、いくつかの興味深い性質を明らかにした。3) 集積化に適した 2 次元  $\pi$  共役骨格として、チオフェン環を機軸に高度に拡張した種々の  $\pi$  電子系を合成した。ジアーリアルアセチレン類の分子内二重環化反応や、チオフェン縮環ビスデヒドロアヌレンの渡環環化など、独自の反応開発をもとに、一連の多環式  $\pi$  電子系の合成を達成し、それらの高い電子受容性や、結晶状態での配向制御による高い電荷輸送性を実現した。また、ペントレン骨格を中心にもつ反芳香族性に富んだ平面  $\pi$  電子系の合成も達成した。新たな電荷輸送性コアとして期待がもてる骨格である。4) 凝集状態の構造制御の手法として、柔軟な鎖による  $\pi$  クラスター化を提案し、モルフォロジーの制御に有用なことを実験的に示した。柔軟な 2 本のアルキレン鎖によって 2 つの  $\pi$  骨格を連結し、環状 2 量体を形成するという分子設計であり、アルキレン鎖長の違いに応じたゲル化特性、相転移挙動、固体蛍光の変化や、アモルファス性の付与による湾曲性結晶の生成が可能なことを明らかにした。また、発光性  $\pi$  骨格を用いることにより、この分子設計が強いエキシマー発光の実現にも有用なことを示した。Irlle グループでは、5) 複雑分子系の大規模量子化学計算に有効な DFTB 法の開発を完了させた。さらに、TD-DFT 法、TD-DFTB 法、新たに開発した  $\Delta$ DFTB 法を用いて種々の新奇  $\pi$  電子系の励起状態計算をおこない、光・電子機能性分子の新分子設計へと発展させた。6) Irlle グループの理論的検討と山口グループの合成化学の融合により、いくつかの特徴的な発光性分子を開発した。励起状態での特異な構造変化を引き起こす柔軟な非平面  $\pi$  骨格や、励起状態での分子内プロトン移動を引き起こす  $\pi$  骨格を創出し、それらの特異な発光特性を明らかにした。これらの成果に加え、発展的成果として得たのが、7) 優れた耐光性をもつ有機リン発光色素の開発である。従来の蛍光プローブに比べ格段に高い耐光性を示し、超解像顕微鏡の一つである STED イメージングの繰り返し観察を可能にした。バイオイメージングから有機エレクトロニクスまで広範な応用が可能な耐光性発光色素として発展が期待できる。

## (2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

### 1. ホウ素 $\pi$ 電子系の光反応性の解明

概要: ホウ素置換ジベンゾボレピンに光を照射すると,  $4\pi$  電子環状反応が進行し, ボラタアリル 5 員環生成物を与えることを見いだした. これは, 長年追い求められてきた bora-Nazarov 反応の発見であり, カルボカチオン中間体の反応性を, 等電子性のホウ素に置き換えても実現できることを示した結果である. またこの反応様式の一般性を検討する過程で, メシチル置換ボラン類の 1, 6-水素シフトを経由したスピロ環形成という新たな光反応が進行することも明らかにした.

### 2. 柔軟なアルキル鎖を用いた環状構造規制による $\pi$ 電子系の分子配向制御

概要:  $\pi$  電子系の凝集系での物性は分子配向に大きく依存する. その自在制御のための分子設計として, 柔軟な 2 本のアルキレン鎖によって 2 つの  $\pi$  骨格を連結した環状 2 量体構造を考えた. ターチオフエンを  $\pi$  骨格に用いたモデル系を合成し, アルキレン鎖長の違いに応じたゲル化特性, 相転移挙動, 固体蛍光の変化を明らかにした. また, 発光性  $\pi$  骨格を用いることにより, この分子設計が強いエキシマー発光の実現にも有用なことを示した.

### 3. 発光性 ESIPT 分子系の開発と二光子励起発光材料への展開

概要: 水素結合供与能をもつ含ピロール  $\pi$  電子系にアルキルアミン鎖をストラップとして導入することにより, 発光性 ESIPT (励起状態分子内プロトン移動) 色素の開発に成功した. 励起状態でプロトン移動前とプロトン移動後の 2 つの準安定状態をとり, 各々からの蛍光により, 幅広い波長域をカバーする二重発光特性を実現した. さらに構造を修飾することにより, 近赤外光による二光子励起に伴う深赤色発光を示す分子の開発に成功した.

<科学技術イノベーションに大きく寄与する成果>

### 1. ホウ素ドーブナノグラフェンの創製

概要: 2 次元に  $\pi$  共役を拡張した含ホウ素多環式縮合  $\pi$  電子系の開発に成功した. 平面固定化により, 立体保護による速度論的安定化なしでも安定な含ホウ素  $\pi$  電子系が得られることを示した. ホウ素ドーブナノグラフェンのトランジスタ材料やリチウム電池の電極材料への応用, 化学吸着特性を明らかにした. ホウ素ドーブグラフェンナノボンの金属表面上での合成にも成功した.

### 2. 高度に拡張された $\pi$ 共役骨格をもつ電荷輸送材料の開発

概要: ジアリールアセチレン類の二重環化反応の開拓をもとに, テトラチエノナフタレン, チオフエン縮環ペンタフルバレン, ビ(チエノチオフエン)などの基本骨格をもつ種々の  $\pi$  電子系化合物を合成した. それらの固体構造, 光物性, 電気化学特性を検討し, 電荷輸送材料としての潜在性を明らかにした. なかでも,  $\pi$  拡張ペンタレンは縮環構造をもたせることにより高い反芳香族性をもち, 電荷輸送性材料の基本骨格として興味深い.

### 3. 高耐光性発光性有機リン色素の開発

概要: 電子受容性のベンゾホスホールオキシドに電子供与性ジフェニルアミノ基を導入した化合物が媒体の極性に応答して発光色を変化させる環境応答性蛍光プローブとして有用であることを見いだした. 特に, 脂肪細胞の油滴を選択的に染色するのに適しており, バイオイメージングに有用であることを示した. さらにこの骨格を修飾することにより, 格段に高い耐光性をもつ発光性色素の開発に成功し, 超解像 STED 顕微鏡の繰り返し観察を可能にした.

## § 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

①「山口茂弘」グループ

研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
山口 茂弘	名古屋大学	教授	H22.10～
深澤 愛子	名古屋大学	准教授	H22.10～
多喜 正泰	名古屋大学	特任准教授	H26.2～
浅井 健吾	名古屋大学	D3	H24.4～
松尾 恭平	名古屋大学	D3	H23.4～
大島 寛也	名古屋大学	D2	H24.4～
大崎 博司	名古屋大学	D2	H24.4～
安藤 直紀	名古屋大学	D1	H25.4～
鈴木 直弥	名古屋大学	D1	H25.4～
上野 亮	名古屋大学	M2	H26.4～
岩原 秀明	名古屋大学	M2	H26.4～
柏木 章宏	名古屋大学	M2	H26.4～
河内 寛明	名古屋大学	M2	H26.4～
須田 真司	名古屋大学	M2	H26.4～
早乙女 広樹	名古屋大学	M2	H26.4～
畔柳 早希	名古屋大学	M1	H27.4～
窪田 智也	名古屋大学	M1	H27.4～
近藤 美希	名古屋大学	M1	H27.4～
戸田 雄佑	名古屋大学	M1	H27.4～
安藤 幹規	名古屋大学	M1	H27.4～
難波 誉昌	名古屋大学	M1	H27.4～
田邊 誼之	名古屋大学	M1	H27.4～
森 雄輝	名古屋大学	M1	H27.4～
齊藤 尚平	名古屋大学	助教	H22.10～H28.2
Gao LiBin	名古屋大学	博士研究員	H22.10～H22.12
Chunxue Yuan	名古屋大学	博士研究員	H23.7～H25.9
信末 俊平	名古屋大学	博士研究員	H25.4～H27.3
名倉 和彦	名古屋大学	博士研究員	H25.4～H27.3
櫛田 知克	名古屋大学	博士研究員	H25.9～H26.3
山口 恵理子	名古屋大学	博士研究員	H27.5～H27.10
Chuangdong Dou	名古屋大学	博士研究員	H23.7～H25.7
Yongfa Xie	名古屋大学	博士研究員	H27.8～H27.10
飯田 あずさ	名古屋大学	D3	H22.10～H24.3
毛利 和弘	名古屋大学	D3	H22.10～H25.3
名倉 和彦	名古屋大学	D3	H22.10～H25.3
櫛田 知克	名古屋大学	D3	H22.10～H25.8
山口 恵理子	名古屋大学	D3	H22.10～H27.4
猫橋 祐貴	名古屋大学	M2	H22.10～H23.3
荒木 貴史	名古屋大学	M2	H22.10～H23.3
丹下 聡	名古屋大学	M2	H22.10～H23.3
中倉 健	名古屋大学	M2	H22.10～H23.3
岸 大将	名古屋大学	M2	H22.10～H23.3

林 賢三	名古屋大学	M2	H22.10～H23.3
関岡 杏奈	名古屋大学	M2	H22.10～H25.3
首藤 亜由美	名古屋大学	M2	H22.10～H25.3
臼井 孝介	名古屋大学	M2	H23.4～H25.3
暮石 結加	名古屋大学	M2	H23.4～H25.3
白井 秀典	名古屋大学	M2	H24.4～H26.3
津坂 英里	名古屋大学	M2	H24.4～H26.3
峯村 和光	名古屋大学	M2	H24.4～H26.3
吉川 利樹	名古屋大学	M2	H24.4～H26.3
安達 誠	名古屋大学	M2	H25.4～H27.3
大角 真一郎	名古屋大学	M2	H25.4～H27.3
森 千草	名古屋大学	M2	H25.4～H27.3
吉田 佑貴	名古屋大学	M2	H25.4～H27.3
Soren Mellerup	クイーンズ大学	M1	H27.7～H27.9

#### 研究項目

- ・ 典型元素を含む新奇  $\pi$  電子系の開発
- ・ 拡張二次元  $\pi$  電子系の構築
- ・ ソフト凝集状態の構造修飾と機能追究

#### ②「Stephan Irle」グループ

##### 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
IRLE Stephan	名古屋大学 トランスフォー ーマティブ生命分子研究 所 (WPI-ITbM)	教授	H24.4～
横川 大輔	同上	特任准教授	H24.4～
土方 優	同上	特任助教	H26.4～
CAMACHO Christopher Leandro	名古屋大学大学院理学 研究科 物質理学専攻(化 学系)	研究員	H24.4～H25.2
Li Haibei	京大福井謙一記念研究セ ンター	研究員	H24.4～H26.3
REDDY Venapussa Sivaranjana	名古屋大学大学院理学 研究科 物質理学専攻(化 学系)	研究員	H24.12～H27.3
KOWALCZYK Timothy	名古屋大学大学院理学 研究科 物質理学専攻(化 学系)	JSPS 研究員	H25.12～H27.3
鬼頭 宏任	同上	研究員	H25.4～
WELKE Kai	同上	研究員	H26.4～H27.10
WELKE Kai	名古屋大学 トランスフォー ーマティブ生命分子研究 所 (WPI-ITbM)	JSPS 研究員	H27.10～
西村 好史	名古屋大学大学院理学 研究科 物質理学専攻(化 学系)	D3	H24.4～H25.3
西本 佳央	同上	D2～D3	H24.4～H26.3
Arifin	同上	D1～D3	H25.4～

白井 孝介	同上	D1~D3	H25.4~
-------	----	-------	--------

研究項目

- ・ 新奇  $\pi$  電子系の量子化学解析

(2)国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

山口グループでは以下のグループとの共同研究体制、ネットワークの構築を行ってきた。

1. 吉澤一成教授(九大):反応機構に対する量子化学的検討
2. 関修平教授(京大):電荷移動度測定
3. 吉尾正史准教授(東大):液晶性化合物の電荷移動度のTOF測定
4. 川井茂樹博士(スイス):B-ドーピンググラフェンナノリボンの創製
5. 梶弘典教授(京大):ホウ素化合物の有機EL素子への応用
6. 宮坂博教授(阪大):ホウ素化合物の励起状態ダイナミクス
7. 阿波賀邦夫教授(名大):リチウム電池への応用
8. 東山哲也教授, 佐藤良勝准教授(名大):バイオイメージングへの応用

一方, Irlle グループでは, 以下のグループとの共同研究体制, ネットワークの構築を行ってきた。

Collaborations with foreign research groups:

1. Professor Henryk Witek, National Chiao Tung University, Taiwan. Research topic: DFTB parameter development. CREST sponsored members: 1 postdoc, 1 PhD student.
2. Professor Jungsuttiwong Siriporn, Ubon Ratchathani University, Thailand. Research topic: Dynamics of large molecules in excited states. CREST sponsored member: 1 PhD student.
3. Professor Nawee Kungwang, Chiang Mai University, Thailand. Research topic: Dynamics of large molecules in excited states. CREST sponsored member: 1 PhD student.

### § 3 研究実施内容及び成果

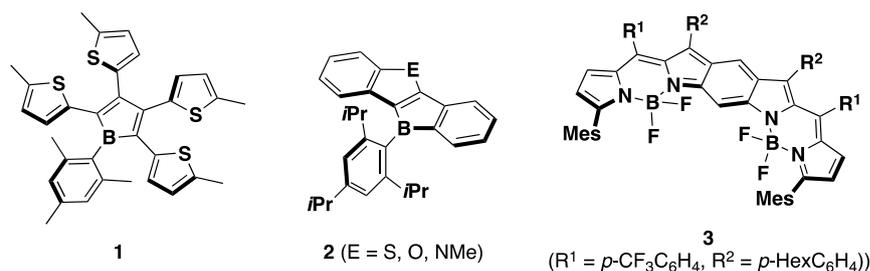
本研究は、次世代の有機エレクトロニクス技術の発展の礎となりうる優れた  $\pi$  共役骨格の創出と、その凝集構造の制御による特異な物性や機能の発現を目的としている。これまでの材料開発の進め方の大半は既存の基本骨格の修飾と組み合わせによるものであり、真に新奇な骨格の創出となるとなかなか難しいのが実状である。本研究では、1) まったく新しい骨格をいかに創り出すか、そして 2) その骨格を凝集状態でいかにユニークな形で配向させ、特異な物性を発現させるか、という 2 つの観点から以下の 5 項目に取り組んだ。

#### 3. 1 典型元素を含む新奇 $\pi$ 電子系の構築 (名古屋大学 山口グループ)

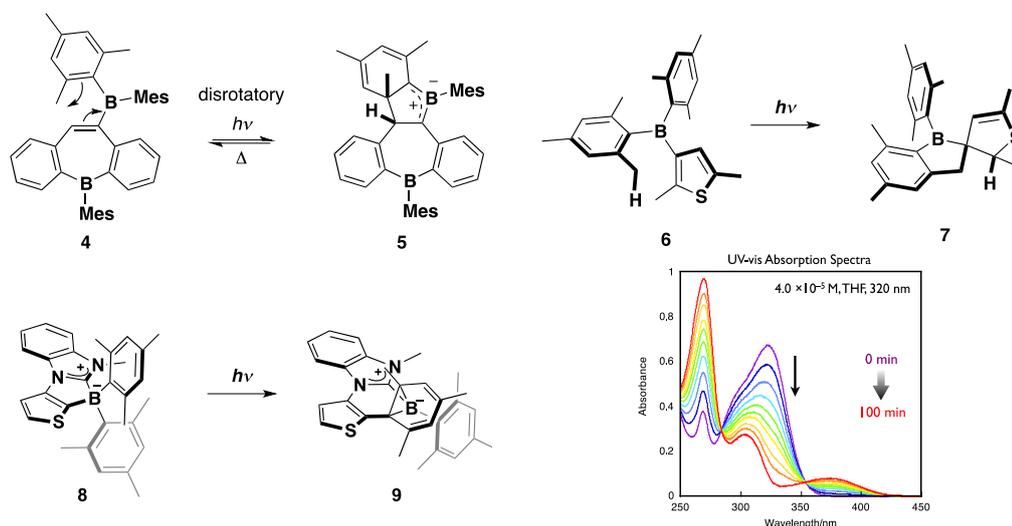
##### (1) 研究実施内容及び成果

特異な電子構造をもつ新奇な  $\pi$  共役骨格の設計に対する我々のアプローチは、典型元素の導入である。B, Si, P などの典型元素は、電気陰性度、電子数、配位数、構造などの点で多様である。これらの個々の元素の特性を生かした分子設計により、特徴的な分子構造、電子構造、物性、さらには新たな機能をもつ骨格の創出が期待できる。数ある典型元素の中でも本研究ではまずホウ素に着目した。ホウ素を  $\pi$  共役骨格に導入することにより、電子受容性を  $\pi$  骨格に付与できる。ホウ素の導入のポイントとして 3 つ挙げられる。1) ホウ素は、炭素と比較して電気陰性度が小さいため、誘起効果による電子供与性、すなわち  $\sigma$  供与性をもつ。一方で、2) ホウ素は、三配位状態では空の p 軌道をもつため、 $\pi$  共役骨格との p- $\pi^*$  相互作用により強い電子受容性基としてはたらく。その強さはシアノ基と同程度である。3) 三配位ホウ素は、空の p 軌道に由来してルイス酸性をもつ。このルイス酸性に起因した四配位ボラートの形成に伴い、電子構造ひいては物性が大幅に変化する。これらの特性を利用することにより、電子輸送性材料、発光性有機固体、化学センサーの開発など、多様な視点からの応用研究をこれまで展開してきた。本研究では次に述べる成果を得た。

**特異な電子構造をもつ新奇ホウ素  $\pi$  電子系の創製** ホウ素の空の p 軌道と  $\pi$  共役骨格の  $\pi^*$  軌道との軌道相互作用が有効に作用する系の一つとして、ボロールに焦点をあてた。ボロールはシクロペンタジエニルカチオンと等電子構造の  $4\pi$  電子系であり、反芳香族性を示す。そのため、極めて不安定であるが、同時に特異な電子構造をもつ。我々はより特異な電子構造をもつボロール誘導体の創製に取り組んだ。この骨格は高い電子受容性骨格として広く認識されているが、ホウ素の誘起効果により実は比較的高い HOMO 準位をもつ。この点に着眼し、この特性をより顕著にしたテトラチエニルボロール **1** の合成を達成し、その特異な物性を明らかにした (*ACIE* 2012)。また、チオフェンやピロールなどの複素環芳香族を縮環させた一連のラダー型ボロール **2** の合成も達成し、これらが高い反芳香族性をもつことを示した (*JACS* 2011)。ボロールのような反芳香族性の環骨格の安定化には、芳香環で縮環させることが有効であると長らく考えられてきたが、これが当てはまるのはベンゼンのみであり、複素環芳香族の場合にはむしろ不安定化を招く、というこれまでの常識を覆す結果である (*CS* 2012)。得られた  $\pi$  電子系は、他のヘテロール骨格では実現できない吸収特性、酸化還元特性を示した。また、このボロールの化学以外にも、ホウ素を用いた近赤外可視吸収材料 **3** の開発 (*CS* 2013) を達成した。BODIPY という基本骨格への縮環様式を工夫し、二量化することにより、強い幅広い吸収を可視-近赤外領域にもたせることができる。



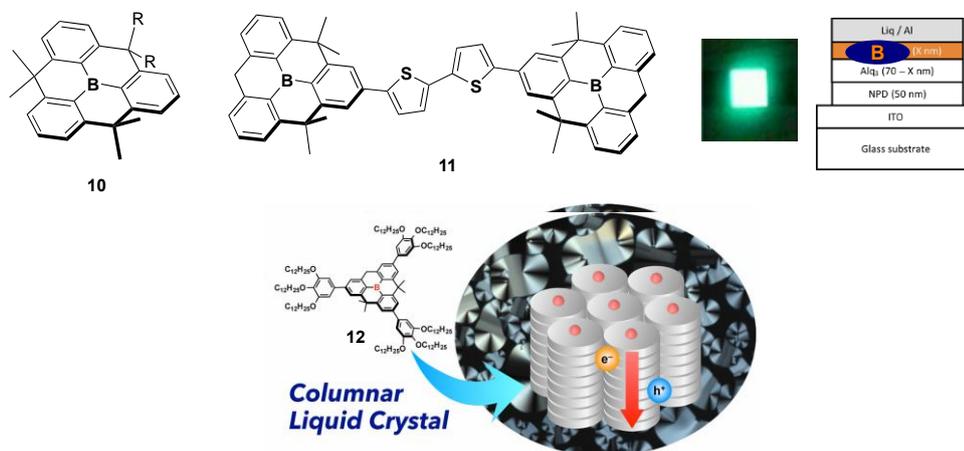
**ホウ素  $\pi$  電子系の新たな光反応性の開拓** 上述のボロール骨格を用いた新たな  $\pi$  電子系の創製研究を進める中で、予期せぬ生成物としてホウ素置換ジベンゾボレピン **4** を得た。従来の蛍光性のジベンゾボレピン類とは異なり、この誘導体がフォトクロミック特性を示すことを見出した。詳細な検討の結果、 $4\pi$  電子環状反応が進行し、ボラタリル 5 員環骨格 **5** が生成することがわかった (ACIE 2013)。これは、長年追い求められてきた bora-Nazarov 反応の発見であり、カルボカチオン中間体の反応性を、等電子性のホウ素に置き換えても実現できることを示した結果である。



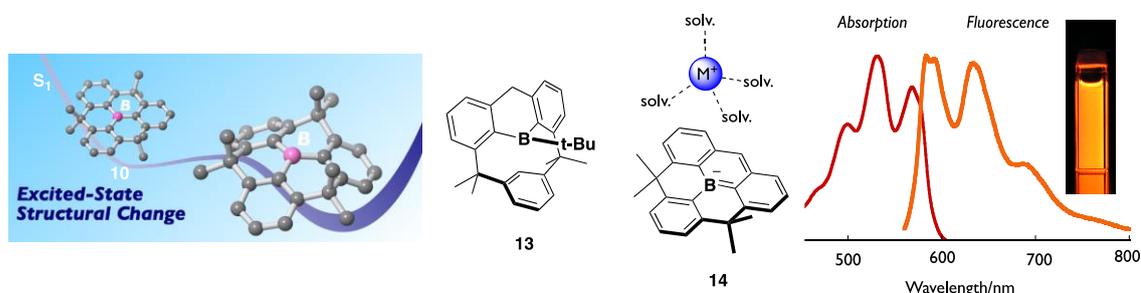
この他にも、特異なフォトクロミック特性をもつ新奇ホウ素化合物として分子内カルベン配位 4 配位ボラン **8** の合成にも成功した (ACIE 2012)。ホウ素に安定化 N-ヘテロ環カルベンが配位することによりチエニル基の求核性が増し、照射下で容易にメシチル基のイプソ炭素へ転位した生成物 **9** を与える。

**ホウ素  $\pi$  電子系の新たな安定化法の確立と機能開拓** 材料として有機ホウ素化合物を応用するには、高いルイス酸性に由来した不安定性が常に問題となり、いかに安定化するかが重要な課題である。これに対して我々は、「構造固定による安定化」という概念を提案した。この考え方の有用性を実証するために、3つのフェニル基をメチレン鎖で平面に固定した平面固定トリフェニルボラン **10** を合成した (JACS 2012)。この化合物は、立体的にかさ高い置換基をもたないにもかかわらず、空气中で安定であり、水を用いた抽出分離やシリカゲルカラムクロマトグラフィーでも全く分解しない。構造固定されていないトリフェニルボランがシリカゲル上ですぐに分解してしまうのと対照的である。化合物 **10** は、塩基性条件を必要とする鈴木カップリングなどの反応条件下でも十分に安定であり、この骨格を構成単位に用いてさらに拡張した  $\pi$  電子系を合成できる。例えば、この手法により合成した **11** は、真空蒸着が

可能であり、有機 EL 素子の電子輸送性材料として有用であった(OL 2013). さらには、三方向に長鎖アルキル基を導入した誘導体 **12** の合成に成功し、この化合物が室温を含む温度域でヘキサゴナルカラムナー液晶相を示し、両極性の電荷輸送特性を示すことを TOF 測定により明らかにした(ACIE 2015, VIP). 平面固定化することから実現できる構造体、物性であるといえる. 更なる構造修飾により、高度に組織化された電子材料への展開が期待できる.

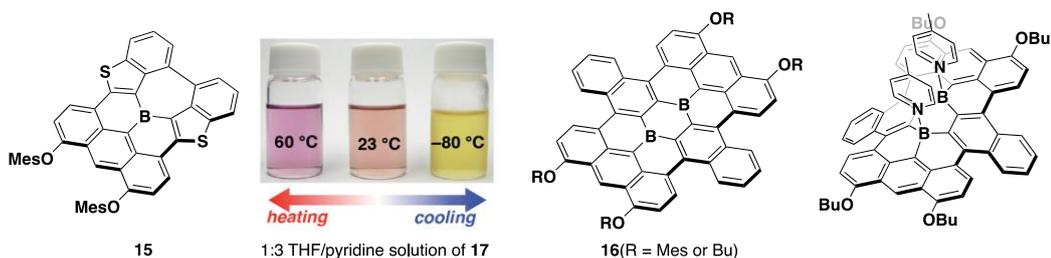


平面固定トリフェニルボランは、単純な構造でありながら興味深い二重発光性を示した(CS 2014, Cover). 室温では 400 nm 付近に幅広い蛍光を示すのに対し、低温に下げることにより、次第にこの発光帯は消失し、新たな発光帯が 330 nm 付近に出現した. 励起状態での理論計算により、この変化が励起状態での平面からボウル型構造への構造変化の抑制によることを明らかにした (Irlle G との共同研究). 同様のボウル型構造は、この骨格が一電子還元されて生じるラジカルアニオン種でも見られることが、X 線構造解析によって示された(OM 2013). これらの結果は、この骨格は強固に固定されているように見えるが、実は依然柔軟性をもつことを示している. 実際、**10** に求核剤を用いた場合には開環生成物であるボラシクロファン **13** が得られることを見出した(ACIE 2013). この生成物は、ルイス酸であるホウ素とベンゼン環との相互作用を理解する上で格好のモデルといえ、その相互作用の性質をベンゼン環の修飾により  $\sigma$  錯体性から  $\pi$  錯体性まで変化させられることを実験的に示した. また、**10** に求核剤ではなく塩基を作用させることにより、発光性ボラタアントラセン **14** の合成にも成功している. この化合物は、等電子構造のアントラセンと比べて著しく長波長に蛍光極大をもち、強い橙色蛍光 ( $\lambda_{em}$  584 nm,  $\Phi_F = 0.45$ , THF) を示した(CC 2012, Cover).

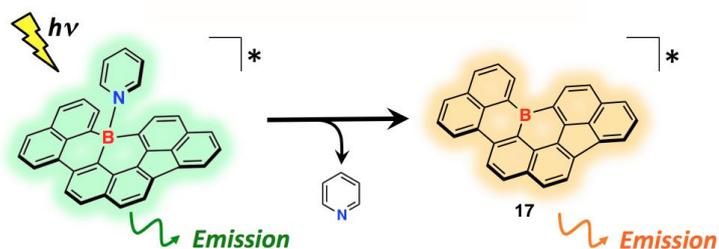


**ホウ素ドーパナノグラフェンの創製と応用** 平面固定トリフェニルボラン **10** では、トリアリールボラン骨格を sp<sup>3</sup> 炭素で平面に固定しているため、 $\pi$  共役の広がりという点で制約があった. これに対して、全て sp<sup>2</sup> 炭素からなる  $\pi$  共役骨格にホウ素を組

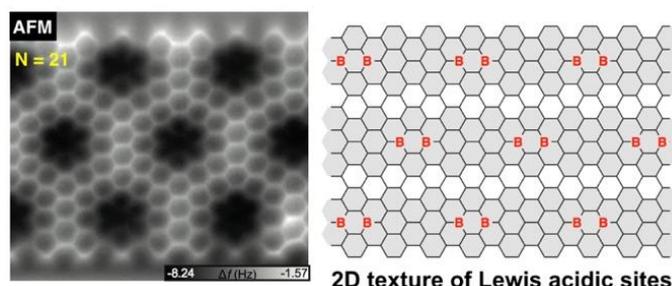
み込んだ化合物 **15** (*JACS* 2012, *Spotlight*) や **16** (*ACIE* 2012) の合成を、全く異なる合成手法により達成することができた。これらの化合物は、ホウ素をドーブしたグラフェンのモデル系と見なすことができ、新たなナノグラフェン材料として興味深い。特筆すべきは、これらの化合物も **10** と同様に、空気、水、シリカゲルに対して高い安定性を示す点である。これらの化合物の特徴の一つは、多環式縮合  $\pi$  骨格とホウ素との軌道相互作用により生み出される特異な電子構造である。例えば、化合物 **15**, **16** はいずれも可視領域での長波長吸収や近赤外領域に及ぶ蛍光などの興味深い光物性を示した。また、これらの化合物は平面固定化されているにもかかわらずルイス酸性を有しており、ルイス塩基の添加によるホウ素の配位数変化に応じて劇的な物性変化を示した。例えば、化合物 **15** の THF・ピリジンの混合溶液では、3 配位ホウ素種とピリジンが配位した 4 配位ホウ素種との平衡が存在し、その平衡が温度により移動することで、溶液色が紫から黄色へと変化するサーモクロミズムを示した (*JACS* 2012)。さらに、ホウ素原子を 2 つ有する **16** にピリジンなどの塩基を作用させると、2 つのホウ素がともに 4 配位となった 1:2 錯体をシス選択的に生成した (投稿中)。これらの結果は、ホウ素ドーブグラフェン材料の化学吸着能を示すものであり、センサーなどへの応用を示唆するものである。特に、アンモニアなどのガスにも応答することがわかっており、NO<sub>2</sub> ガスなどへの展開も含めて、重要な応用可能性を示す結果である。また、化合物 **16** は、サイクリックボルタンメトリーで一段階の可逆な酸化過程と二段階の可逆な還元過程を示し、優れた電子授受能をもつことがわかった。これらの化合物のリチウム電池の電極材料への応用を、阿波賀グループ (名大, 本 CREST) との共同により検討し、その潜在性を明らかにした (投稿中)。



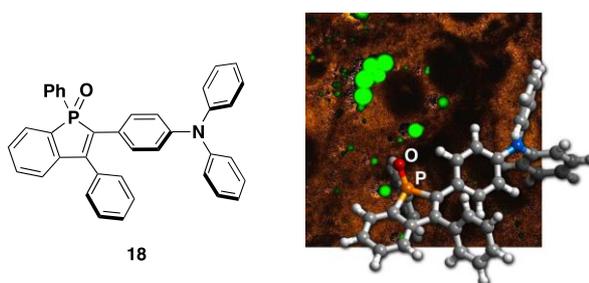
この化学の更なる発展として、トリナフチルボラン **17** の合成にも成功した (*JACS* 2014)。この化合物は、トリス(プロモナフチル)ボランからのラジカル的分子内環化反応により予期しない生成物として得られた。部分的にしか平面固定化されていないにもかかわらず、高い化学的安定性を示す一方で、完全に平面固定された類縁体に比べて高いルイス酸性をもち、室温でもピリジンと容易に錯体を形成した。近年、分子内に B-N 配位結合をもつ  $\pi$  共役化合物の特異な光反応性が報告され、新たなフォトクロミック材料としての期待が高まっている。しかし、それらの変化は主に B-C 結合の転位によるものであり、B-N 結合の切断は起こらない。これに対して化合物 **17** のピリジン錯体は、光励起状態においてトリナフチルボランとピリジンへ容易に解離し、二重発光性を示すことがわかった。この B-N 酸塩基対の新たな光反応性は、等電子構造であるトリアリールメタンロイコ色素の光照射によるカルボカチオンの生成に類似している点で興味深い。



ホウ素ドーピンググラフェンの開発研究の観点において、上述のモデル系からの検討に留まらず、より精緻に構造が制御されたグラフェン材料の合成にもスイス、バーゼル大の川井らとの共同研究により取り組んだ。新たに設計・合成したホウ素を含む前駆体分子を金属表面上に蒸着し、さらに3段階に加熱することにより、ホウ素を含んださまざまな幅のグラフェンナノリボンの生成に成功した(*Nat. Commun.* 2015).



**有機リン発光性色素の開発** 電子受容性に富んだ $\pi$ 骨格の構築という観点で、ホウ素以外にも、リンを含んだ $\pi$ 電子系の開発も進めた。特に、P=O 部位は強い電子求引基として働き、電子供与性置換基と組み合わせることにより、特徴的な光物性をもつドナー・アクセプター型の $\pi$ 電子系ができる。その一つの例として、アミノフェニル基を2位に導入したベンゾホスホールオキシド **18** を開発した (*ACIE* 2015, *Cover*)。この化合物は、溶媒の極性の上昇に応じて顕著な長波長シフトを示し、極性溶媒やプロトン性溶媒中においても高い蛍光量子収率を保持することがわかった。この特性は、環境応答性蛍光プローブとしての有用性を示すものであり、実際に細胞の染色実験を行ったところ、脂肪細胞の油滴の染色に有用であることがわかった。理由は依然不明だが、細胞膜は染めずに脂肪細胞の油滴のみを染色できる点が、従来の BODIPY や Nile Red などの蛍光色素に優る点である。脂肪細胞の油滴の染色は、



医療・健康分野や食品分野の研究開発において極めて重要な研究ツールとなるものであり、含リン $\pi$ 電子系の新たな展開の可能性を示すことができたといえる。

### 3.2 拡張二次元 $\pi$ 電子系の構築 (名古屋大学 山口グループ)

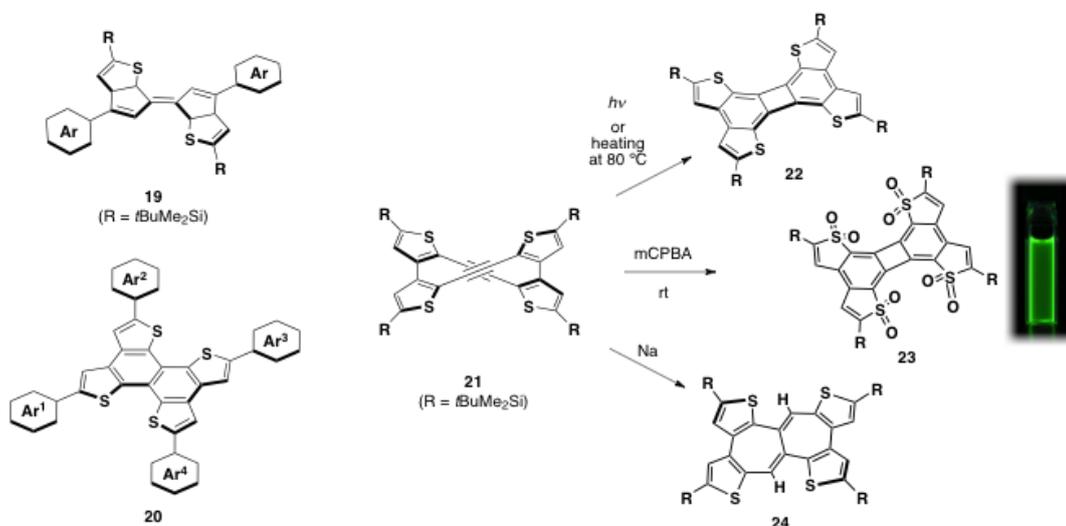
#### (1) 研究実施内容及び成果

新たな機能の付与という点で魅力的なのが、高度な広がりをもつ $\pi$ 共役骨格である。例えば、3次元 $\pi$ 共役系の代表例であるフラーレン誘導体は、球状であることを反映して優れた n 型半導体特性をもち、有機太陽電池研究において不可欠の材料となっている。しかし、 $\pi$ 共役の広がりという観点では、球面(曲面)的な3次元構造よりも平面状に広がる2次元共役系の方が本質的にはより有効な拡張が可能である。本研究では、洗練された幾つか2次元拡張 $\pi$ 電子系の創出に挑戦してきた。分子設計の一つの視点は、剛直で平面性の高い骨格の創出である。ヘキサベンゾコロネン

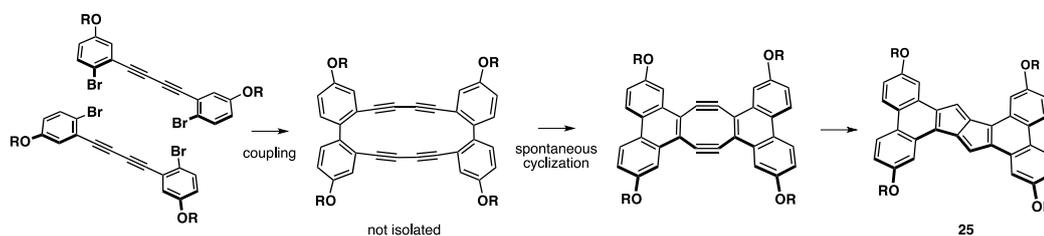
(HBC)に代表される平面性 2 次元骨格は、高度な軌道の広がりにより、分子間での有効な相互作用を生じ、凝集状態での特異な物性の発現につながる。実際に HBC 骨格を機軸にこれまで膨大な研究が展開され、この分野の発展に大いに貢献してきた。逆に言えば、HBC の存在が分野の発展を可能にしてきたといえる。そのような発展の礎となる秀逸な基本骨格をいかに設計し、その大量供給をいかに可能にするかが本研究の課題である。もう一つの設計の視点は、新奇な 2 次元骨格の創出による分子ならではの機能の実現である。このために骨格の柔軟性に着目した。柔軟性を利用することにより、スイッチング機能などの動的機能の付与が期待できる。柔軟性をもたせるには、非平面性をもたらす 5 員環, 7 員環, 8 員環といった環骨格の導入、立体障害の増大によるねじれ非平面構造の実現、環拡張ポルフィリンなどの大環状共役骨格の実現などのアプローチが考えられる。我々はこれらの中でも、8 員環非平面構造もつシクロオクタテトラエン(COT)に着目し、柔軟骨格の創出に挑んだ。

本研究の推進にあたり重要なのが、優れた基本骨格の大量供給を可能にする力量にあふれた合成化学である。精緻に設計された分子骨格でも、わずかな量でしか合成できないのでは、マテリアルズサイエンスの発展に寄与することは難しい。我々は、優れた骨格を、その骨格を合成するための反応開発から行うという姿勢で研究に取り組んできた。我々の合成法開発の一つの基盤となるのが、ジアリールアセチレン類の二重環化反応である。我々はこれまで種々の機構で進行する二重環化反応を開発することにより、一連のラダー型一次元  $\pi$  電子系の合成を達成してきた (CAJ 2009)。これらの反応開発で蓄積された知見を基盤に、適切に設計された基質を用いることにより、2 次元拡張型平面  $\pi$  電子系の創製に取り組んだ。

**平面性二次元拡張型  $\pi$  電子系の創製** ジアリールアセチレン類の二重環化反応を機軸とした拡張  $\pi$  電子系の合成として、チオフエン縮環ペンタフルバレン **19** の合成を達成した (ACIE 2013)。ビス(アルケニルチエニル)アセチレンを基質に用いて光反応を行うことにより、5-*exo-dig* 様式で二重環化反応が進行し、チオフエン縮環ペンタフルバレン骨格が効率よく形成される。これは電子受容性に富んだ十字型  $\pi$  電子系の構成単位として期待できる。さらに、等方的な広がりをもつ新たな平面性二次元  $\pi$  電子系としてテトラチエノナフタレン(TTN)を標的骨格として設計し、アセチレン類の二重環化反応を機軸にその合成法の開発に取り組んだ。アセチレン前駆体からのワンポット光二重環化反応により、簡便かつ汎用的な合成法を確立した (OL 2013)。これにより TTN 骨格をコアとした様々な置換様式の十字型  $\pi$  電子系 **20** の合成が可能となった。TTN をコア骨格とする一連の  $\pi$  電子系は何れも一次元ナノファイバーを形成しやすく、それらのナノ構造と光物性の相関について明らかにした。また、新たな平面二次元骨格としてテトラチエノビフェニレン **22** の合成にも成功した。高度に歪んだ環状ジアセチレン化合物であるテトラチエノ(ビスデヒドロ[12]アヌレン) **21** からの形式的[2+2]付加環化反応が光だけでなく熱によっても進行することを見出し、この骨格の合成を達成した (JACS 2013)。吉澤グループ (九大) との共同研究による詳細な量子化学的検討の結果、これは単純な対称禁制の[2+2]付加環化反応ではなく、環状アヌレン骨格の  $\pi$  電子系が関与した  $8\pi$  電子環状反応- $4\pi$  電子環状反応が連続的に起こることにより対称許容となり、反応が進行することが明らかになっている。生成したテトラチエノビフェニレンは狭い HOMO-LUMO ギャップをもち、赤紫色を呈する骨格である。

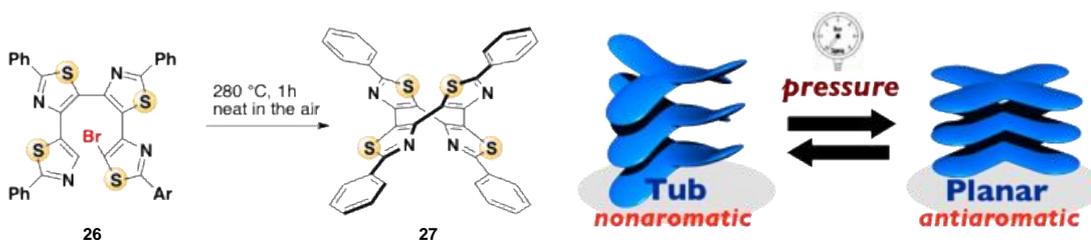


化合物 **21** の形式的[2+2]付加環化は、縮環した芳香環の脱芳香族化を含むため、本質的にエネルギー的に不利である。芳香族性の低いチオフェンを用いたからこそ実現できた反応といえる。逆に言えば、縮環部位の積極的な「脱芳香族化」によって反応性を高められるはずである。この考えから、**21** のチオフェンを酸化したところ、室温においても渡環環化が進行することを見いだした (*JACS* 2014)。縮環部位の芳香族性のスイッチングにより、デヒドロアヌレンの安定性と反応性の制御が可能であることを示したといえる。本法で得られたチオフェン-*S,S*-ジオキソ縮環型ビフェニレン **23** は、剛直で広い  $\pi$  平面をもつことに加え、電子求引性の  $\text{SO}_2$  部位の特徴を反映して高い電子受容性をもち、*n* 型半導体の基本骨格としての潜在性が示唆された。また、 $\text{SO}_2$  の電子効果により他のビフェニレン誘導体とは異なる光学特性を示し、強い蛍光を示すことを見いだした。機能性材料の新たな基本骨格としての展開が期待できる。チオフェン縮環ビスデヒドロ[12]アヌレン **21** の反応性でもう一つ面白いのが、化学還元した場合には、形式的[2+2]付加ではなく、7-endo-exo 様式で環化が進行し、2つの7員環が縮環したヘプタレン骨格を生成することである。得られた化合物 **24** をさらに金属カリウムを用いて還元することにより、 $14\pi$  電子系であるヘプタレンジアニオンの単離に成功し、この骨格が芳香族性をもつことを初めて実験的に示した (*ACIE* 2015)。



**柔軟な非平面性二次元拡張型  $\pi$  電子系の創製と固体構造** 動的な構造変化が可能なコア骨格として、4つのチアゾール環を head-to-tail 型に連結した環状4量体 **27** を設計した。この化合物は中心に8員環のCOT構造をもち、非平面性の化合物である。チアゾール環を head-to-tail 型で連結することにより、この中心骨格の tub 型反転挙動の活性化エネルギーが  $6.8 \text{ kcal/mol}$  と著しく小さくなることを理論計算により明らかにした。これは母体のCOT骨格よりも小さい値であり、究極に柔軟な骨格に設計されているといえる。この骨格の初めての合成を、パラジウム触媒を用いた C-H ア

リール化反応を駆使することにより達成した (ACIE 2012). さらに簡便な合成法の開発を目指し検討し, 非環状チアゾール 4 量体 **26** の熱的な  $8\pi$  電子環状反応によってもこの骨格が得られることを見出し, 一連の誘導体の合成を可能にした (CS 2013). 得られたチアゾール環状 4 量体は非平面構造を取るにもかかわらず, 結晶状態でカラムナー構造を形成する. これに圧力などの外部刺激を加えることにより非平面構造を平面構造へと変化させることができれば, 中心の COT 部分が非芳香族性から反芳香族性へと変化し, 大きく固体電子物性が変化するものと期待できる. そこで高圧化での構造変化について, ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用いた 0–5 GPa の静水圧下における粉末 X 線解析実験により検討した. 高圧下では, 結晶格子は分子の積層方向 ( $c$  軸) へ著しく異方的に収縮し,  $a$  軸方向の収縮は 5 GPa で 4% に満たないのに対し,  $c$  軸方向には 15% もの収縮を示すことを明らかにした (論文準備中). この結果は, 高圧下では, COT 骨格が柔軟に変化し, 反芳香族性の増強を伴うより平面性の高い配座をとることを示唆している. また, COT を二方向に拡張した誘導体の合成についても達成した (JACS 2013, highlighted in C&E news). この化合物は COT の柔軟性に起因して大きな構造変化を励起状態で生じ, この度合いの制御により, その蛍光特性が顕著に変化する. また, 結晶中では密に  $\pi$  スタッキングした構造を形成し, 大きく長波長シフトした蛍光を示す. これらの結果, この化合物は一つの発光団でありながら, 環境に応じて RGB の発光を示すという興味深い光物性を示した. 柔軟な骨格ならではの特性といえる.



#### 4.3 ソフト凝集状態の構造修飾と機能追究 (名古屋大学 山口グループ)

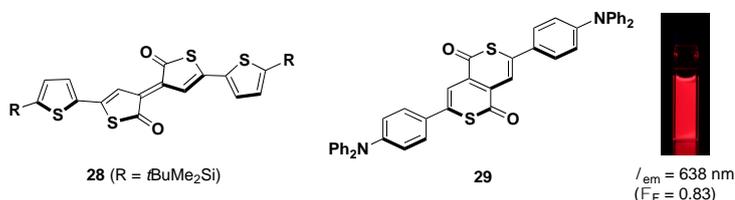
##### (1) 研究実施内容及び成果

$\pi$  電子系の化学の醍醐味, 重要性の一つは, 固体・凝集状態において, 分子一つの場合とは全く異なる光・電子的性質を示すことであろう. その典型例として, J 会合体や H 会合体の形成が挙げられる. 特に分子が適度にずれて  $\pi$  スタックした際に発現する J 会合体では, 吸収・蛍光極大の顕著な長波長シフトや蛍光強度の増大, 分子間軌道相互作用のトランスファー積分の増大等が期待でき, 有機エレクトロニクスへの応用の観点からも面白い. また, 電荷移動度という点では, 当然, 結晶性薄膜かアモルファス薄膜かによって大きく異なる. 結晶性薄膜での分子配向を究めることによりどれだけ高い電荷移動度を実現できるかも一つの課題であろうし, 一方で, 本質的には移動度が劣るアモルファス薄膜でどれだけ高い値を達成できるかも重要な課題である. これらの特性の実現を目標に掲げ, 特異な分子配向を実現するのに適した新奇  $\pi$  共役骨格の創出, および固体構造を制御するための新たな分子設計指針の確立に取り組んだ.

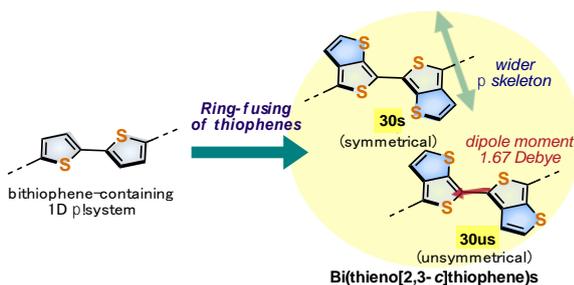
凝集状態での分子配向を制御するための我々のアプローチは次の 2 つである. すなわち, 一つは, 密なパッキング構造の形成に適した骨格をつくること, もう一つは, 密なパッキング構造をとりやすい骨格の分子配向を意図的に妨げることである. 前者の方策としては, いろいろな要素が考えられるであろうが, ドナー-アクセプター構造の組み合わせによる静電的相互作用の増大, および  $\pi$  共役骨格の二次元的な拡張による分子間相互作用の増大に焦点を当て, 分子設計を行った. また後者は, 微

視的には分子配向が制御された構造をもつ“アモルファス”薄膜の創製へ向けた挑戦である。元来、アモルファス薄膜は分子配向をもたないことがその定義であるが、有機 EL 材料等への応用を考えた場合、より高い電荷移動度をもつアモルファス材料の創出は依然重要な課題である。この実現のための一つの分子設計指針を提案することを目指して、柔軟なアルキル鎖を用いた環状構造規制による分子配向制御という考え方を案出し、その有用性の検討を行った。

**分子配向制御に適した新奇オリゴチオフェン誘導体の創製** 密なパッキング構造の形成に適した骨格として、チオフェン環を構成単位とする種々の新骨格の創製とその固体構造、電子構造の検討に取り組んだ。まず、ペックマン色素の酸素原子を硫黄原子に置き換えた S-ペックマン色素 **28** を新たに開発した (CC 2013, back cover)。この化合物は、3,3'-連結構造を含むオリゴチオフェンの酸化により簡便に合成できる。中央のチオラクトン部位と末端のチオフェン部位との分子間相互作用に起因して特異な  $\pi$  スタッキングを形成し、溶液状態では青色を呈するのに対し、結晶状態では金属光沢をもつ黒色を示した。固体状態での反射スペクトルでは、吸収端は大幅に長波長シフトし、1150 nm まで達していた。

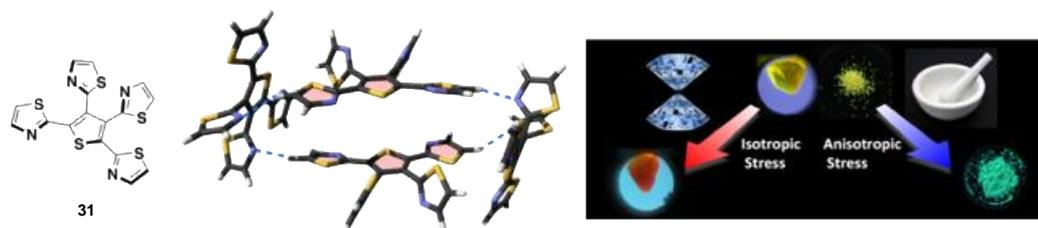


オリゴチオフェン骨格に縮環構造を導入することで共役の幅を厚くできると考え、2,2'-ビ(チエノ[2,3-*c*]チオフェン)を基本骨格とする一連の  $\pi$  共役分子 **30** の合成を行った。この化合物も、末端の  $\pi$  共役置換基の適切な選択により J 会合体様の固体構造の形成が可能であり、実際、末端にトリフルオロメチルフェニル基を有する誘導体は結晶状態で顕著に長波長シフトした発光を示し、また、代表的な有機半導体であるペンタセン薄膜の値 ( $0.5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) を凌駕する高い電荷移動度 (TRMC 測定,  $\sim 4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) をもつことを関グループ (阪大) との共同研究により明らかにした (ACIE 2013)。さらには、縮環させるチオフェン環の向きを変え、非対称化することにより、極性官能基をもたないにもかかわらず双極子モーメントをもたせられ、この特性を利用することによっても分子配向の修飾が可能であることを示した。

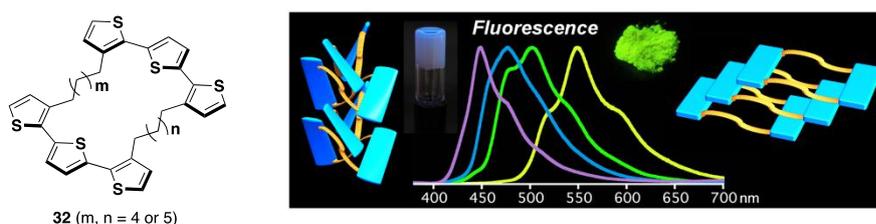


**弱い芳香環水素結合ネットワークの形成とメカノクロミズム** 分子配向を制御する方策としても一つ挙げられるのが、C-H...X 等の弱い水素結合によるネットワーク構造の形成である。しかし、これを意図的に設計するのは難しい。本研究では、n 型半導体アモルファス材料の一つの候補として合成したテトラチアゾリルチオフェン **31** が興味深い水素結合ネットワーク構造を結晶状態で形成し、興味深いメカノクロミズムを示すことを見出した (JACS 2013)。近年、機械的刺激による化合物の吸収・発光スペクトルの変化 (メカノクロミズム) の研究が急速に進んでいるが、一般に、固体をすり潰すことによる変化 (トリボクロミズム) と静水圧下における変

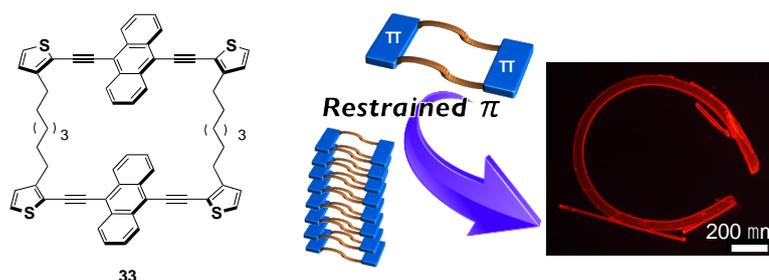
化（ピエゾクロミズム）は、似たような応答性を示すと考えられてきた。これに対し、化合物 **31** はこれら 2 つの機械的刺激に対して全く異なる発光応答性を示した。**31** は結晶中において 3 次元的な水素結合ネットワークを形成し、556 nm にエキシマー発光とみられる黄色蛍光を示す。この結晶をすり潰した粉末は短波長シフトした青緑色の蛍光(490 nm)を示したのに対し、ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用いた静水圧条件下では、結晶の発光極大は圧力に応じて長波長シフトし、3.2 GPa では橙色蛍光 (608 nm) を示した。また、脱圧により蛍光色の可逆な変化が見られた。常圧および加圧下における X 線構造解析, IR, 固体 NMR スペクトル, DFT 計算の結果から、すり潰しによる短波長シフトは水素結合ネットワークの破壊に伴うエキシマー形成の阻害に起因し、静水圧下の長波長シフトは二量体構造における  $\pi$  平面の近接化に起因することを明らかにした。2 つの機械的刺激を明確に区別するメカノクロミズム研究の重要な一例となる結果である (65 times cited)。



**$\pi$  共役骨格のクラスター化による分子配向制御** 固体状態での  $\pi$  共役骨格の配向制御のための方法論として、「柔軟なアルキル鎖を用いた大環状構造の形成による構造規制」という考え方を提案し、材料開発を進めてきた。まず、この考え方の有用性を示すことを目的に、 $\pi$  骨格として最も基本的な骨格の一つであるチオフェンを選び、2 つのこの骨格を 2 本のアルキル鎖で連結した一連の **32** を合成し、固体状態の構造と物性の相関について調べた (ACIE 2012)。リンカーであるアルキル鎖の長さが対称/非対称または偶数/奇数であるかに依存して、大きくパッキング構造が異なり、相転移挙動、ゲル化能、固体蛍光といった物性に大きな違いが見られた。蛍光極大波長の差は、アルキル鎖長の違いだけで最大で 100 nm 以上にものぼる。この方法論の有用性を示す結果といえる。



このアプローチの一般性を示すために、オリゴチオフェン以外の  $\pi$  共役骨格を用いて検討を進めた。 $\pi$  共役骨格として剛直で、発光性に優れたジエチニルアントラセンを選び、この比較的大きな  $\pi$  共役骨格を異なる長さのアルキル鎖で架橋した環状二量体 **33** を合成したところ、適切な鎖長をもつ分子のみが大きく歪曲した結晶を形成することを見出した (CS 2015)。適度に長い鎖からなる環状分子では、アルキル鎖は環状構造の隙間の空間を埋めるようにより柔軟に異なる配座をとる。そのため、異なる配座を有する分子からなる 2 つの相が結晶形成の際に混在することで、湾曲した結晶成長が実現したものと考えられる。この知見は、 $\pi$  共役分子の結晶外形を分子レベルの設計にもとづいて誘起できるという点で興味深い。



33

### 3. 4 量子化学的検討: 大規模計算を可能にする SCC-DFTB 法の開発 (名古屋大学 Irle グループ)

#### (1) 研究実施内容及び成果

In our theoretical research, we focused on two tasks: a) we have driven the further development of the self-consistent-charge density-functional tight-binding (DFTB) method for complex systems in both ground and excited states with focus on massively parallel algorithms, and b) we applied standard DFTB, time-dependent DFTB (TD-DFTB), our new  $\Delta$ DFTB, TD-DFT, and *ab initio* quantum chemical methods in the calculation of excited states structures, reactions, and dynamics of  $\pi$ -conjugated compounds of interest to the Yamaguchi group. The individual research results will be discussed in the respective sections below.

#### a) DFTB Method Development for Complex Systems in Ground and Excited States.

##### a.1) DFTB Parameter Development

We completed the semi-automatic parameterization of the DFTB electronic parameters. For this purpose, we chose a parallel particle swarm optimization (PSO) strategy for the optimization of the confinement potential that allows the tuning of the electronic parameters within the minimum basis set, two-center approximation of DFTB. Fig. 1 displays a performance comparison between old and new parameters for the reproduction of the PBE DFT bandstructure of bulk diamond, silicon, and iron. It can be seen in this graph that the new parameterization scheme is capable to produce DFTB parameters that deliver much improved, near quantitative agreement with the first principle calculations, at least for electronic states up to +5 eV above the Fermi level (midpoint of the HOMO-LUMO gap). A paper on this PSO strategy has now been accepted, and another one is currently under review. Furthermore, we analyzed the effect of

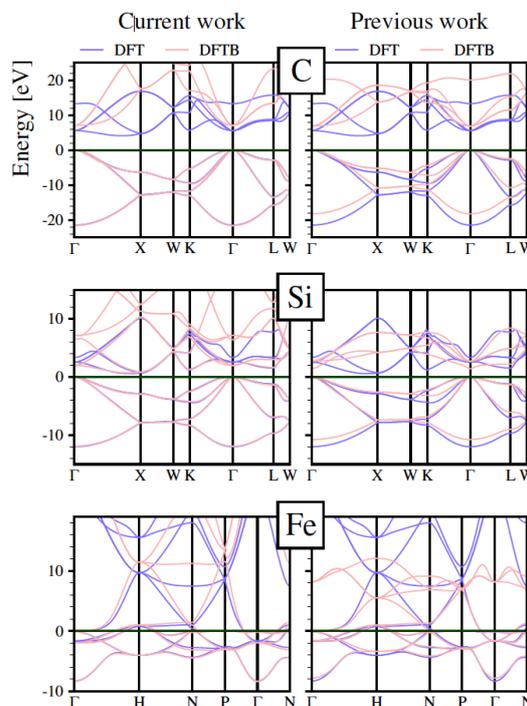
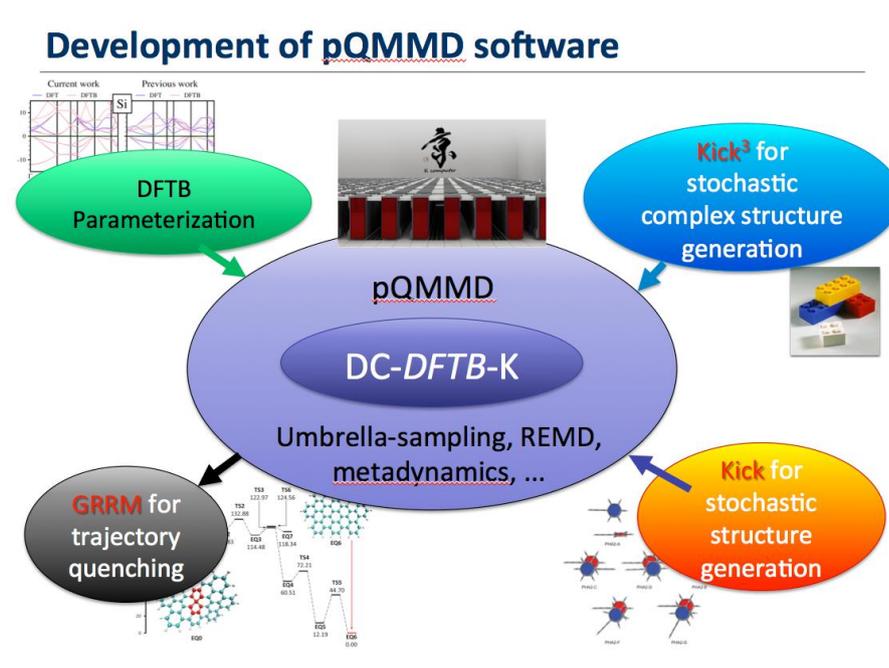


Fig. 1 – DFT-DFTB bandstructure comparison.

the self-interaction error in the DFTB method and published a paper on this error which becomes severe in the case of charge-transfer excited states.

*a.2) Development of a massively parallel DFTB code for the K supercomputer*

With the completion of an automatized scheme for the parameterization of the DFTB method for ground and excited states, we proceeded to implement a novel, massively parallel program for the K-supercomputer and other, similar networked supercomputer systems: pQMMD (parallel QuantuM chemical Molecular Dynamics). As a core member of the Computational Materials Science Initiative



**Fig. 2.** Schematic representation of the newly developed pQMMD software by the Irle group.

(<http://www.cms-initiative.jp/en>), our group has embarked on the path towards creating a multi-purpose molecular dynamics program based on the DFTB flavor of approximate density functional theory (DFT), incorporating elements of stochastic structure generation, on-the-fly parameterization, and replica-exchange molecular dynamics for both ground and excited states (see Fig. 2). Besides the actual implementation of this revolutionary software, as milestones towards achieving this goal, we have published three papers, dealing with repulsive potential parameterization, as well as stochastic structure generation on the basis of DFTB using Kick and the newly developed, more flexible Kick<sup>3</sup> software.

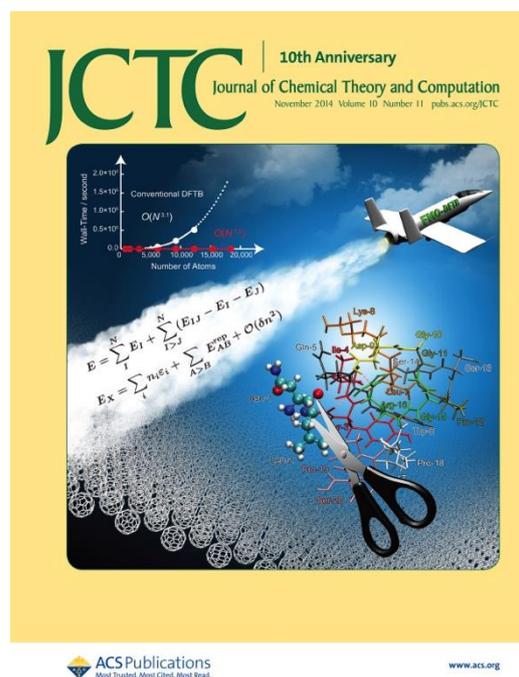
### a.3) Development of linear scaling FMO-DFT

Aside from the further extension and improvement of our own pQMMD (parallel Quantum Molecular Dynamics) code, we implemented DFTB and a novel, linear-scaling variant of DFTB into the widely popular, freely available GAMESS-US code, which is maintained by the group of Mark Gordon at the Ames Lab, located at Iowa State University. The latter method combines the “Fragment Molecular Orbital” (FMO) methodology, as implemented by Professor Kazuo Kitaura and Dr. Dmitri Fedorov in the GAMESS-US code, with all available flavors of DFTB, and this so-called new

“FMO-DFTB” method was shown to scale nearly linearly in computer time with system size. The method was published recently in the prestigious ACS journal “Journal of Chemical Theory and Computation”, and was selected for the cover page of the November issue (see Fig. 3). It also received widespread attention by 31 public scientific news outlets, based on the press release “Ultrafast complex molecular simulations by 'cutting up molecules'”. The method allows the geometry optimization of systems containing more than 1 million atoms (!) using a fully quantum chemical potential, and is aimed at the quantum chemical molecular dynamics (QM/MD) simulations of complex molecular systems in ground and excited states, such as protein-fluorescent label complexes, binding of artificial peptides and/or small, transformative molecules to target proteins, or amorphous mixtures of chromophores linked by flexible linkers as synthesized by the Yamaguchi group.

### a.4) Development of fast $\Delta$ SCF for excited states

As second method development, we succeeded to create a faster excited states version of DFTB, based on the  $\Delta$ SCF methodology by Troy van Voorhis at MIT, and therefore we call this method  $\Delta$ DFTB. This method was demonstrated to be roughly 10 times faster than the conventional time-dependent DFTB (TD-DFTB) method developed previously by Thomas Niehaus for the DFTB treatment of large molecules in electronically excited states, and its implementation into GAMESS-US and the FMO-DFTB code is trivial and currently underway.  $\Delta$ DFTB has already shown excellent performance particularly for larger, 2-dimensional  $\pi$ -conjugated systems such as DNA base pairs and  $\pi$ -ladder compounds developed in the Yamaguchi group. Using  $\Delta$ DFTB for chromophore fragments, we will be able in the future to simulate exciton dynamics in nanometer-scale crystallites of fluorescent organic molecules fully quantum chemically, which marks the first time of an atomistic modeling scheme



**Fig. 3.** Cover image highlighting the new FMO-DFTB method developed by the Irlle group.

for this very difficult topic. A paper summarizing the excellent performance and accuracy of  $\Delta$ DFTB is now in preparation. Both new FMO-DFTB and  $\Delta$ DFTB methods are compatible with, and can take advantage of our previously developed DFTB parameters, as mentioned in our previous H25 CREST report. Furthermore, since the methods are conceptually very straightforward, it will be easy to implement them into the massively parallel pQMMD code aimed to utilize efficiently the K-supercomputer in Kobe.

*a.5) Development of accurate DFTB parameters for water*

The third DFTB-related development concerns the treatment of water with this quantum chemical method. We have studied in great detail the molecular simulation of water and hydration effects in different environments, which we envision will become important in polar solvents including water. We published a Feature Article, together with other groups working on improving the DFTB method, in the ACS “Journal of Physical Chemistry B”, which was also featured on the journal cover.

**b) Application of approximate and standard excited states quantum chemical methods to hard and soft  $\pi$ -materials.**

*b.1) Simulations of UV/Vis spectra and analysis of photophysical properties*

We published a large number of joint experimental-theoretical studies with the Yamaguchi and Itami groups. Most importantly, we revealed that a combination of TD-DFTB molecular dynamics simulations and TD-CAM-B3LYP excited states calculations is capable to predict UV/Vis spectra with striking accuracy, far better than conventional static calculations. Using this methodology, for instance we found that (i) the unusual fluorescence blueshift with increasing molecular size of  $[n]$ cycloparaphenylenes (CPPs) is caused by emission from a combination of bright  $S_2/S_3$  as well as dark  $S_1$ . The former two states form a Jahn-Teller  $E \otimes e$  system giving rise to a double-peak feature in case of large  $n$ , whereas symmetry-breaking occurs in the more flexible, small- $n$  CPPs, allowing radiationless decay of the bright states to  $S_1$ , and radiative emission from  $S_1$  to the ground state. (ii) We have succeeded to perform true quantum nuclear dynamics simulations to explain the coupling between lowest excited singlet states in CPP molecules, using static and dynamic approaches for obtaining the vibronic wavefunctions and the couplings between adiabatic  $S_1$  and  $S_2/S_3$  states. These were the largest applications of vibronic wavefunction based methods to date, and spectacular simply because of the size of the molecules involved. The decrease in the  $S_1 - S_2/S_3$  gaps with increasing size of the CPP macrocycle gives rise to the much-debated fluorescence blueshift in these compounds, and increased quantum yields due to mixing of these three states. This study was also published in the prestigious ACS journal “Journal of Chemical Theory and Computation” (JCTC), and has already received widespread attention at international conferences in both experimental and theoretical communities. (iii) We have theoretically investigated the substituent effect on twisted internal charge transfer (TICT) excited states of  $N$ -borylated carbazoles and (diphenylamino)boranes. SAC-CI calculations demonstrated that TD-B3LYP calculations are able to represent the  $S_1$  excited state potential energy surfaces in these compounds well. Extensive TD-DFT studies of the torsional energy barriers in the excited states revealed that bulky substituents on boron reduce the Stokes shift by decreasing the torsional angle between the N-containing and

the B-containing  $\pi$ -subsystems. Steric and electronic effects can have opposite effects on the Stokes shift. (iv) We have investigated the influence of solvent on UV/Vis spectra using dielectric continuum models.

### b.2) Theoretical Studies of Nanomaterials Formation Mechanisms.

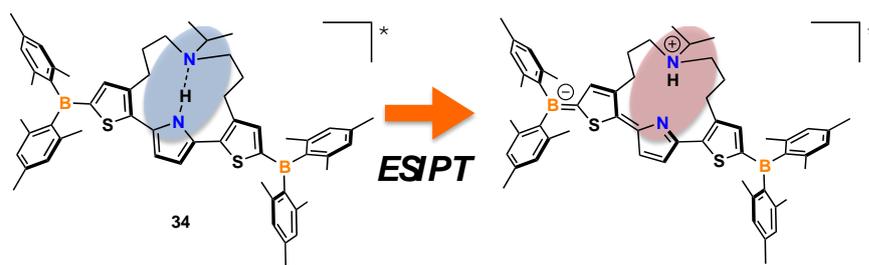
We studied the formation mechanism, molecular and electronic structures of  $\pi$ -conjugated systems, such as covalent organic frameworks, novel carbon nanoysters, carbon nanotubes and graphenes, as well as novel heterofullerenes. Several of these studies were conducted with experimental groups, and two of them were published as Nature Communications.

## 3. 5 励起状態デザインによる発光分子の創製 (名古屋大学 山口・Irle グループ)

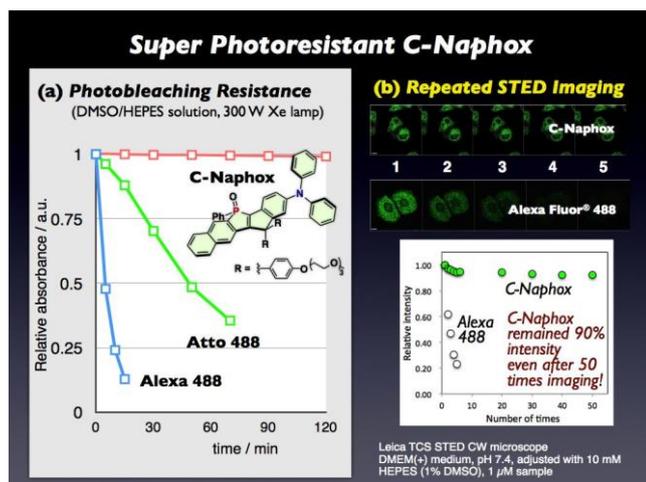
### (1) 研究実施内容及び成果

上述のとおり、山口・Irle グループの合成化学と量子化学的検討の融合により、数々の特徴的な分子系の創出を達成し、その物性の起源の解明を行ってきたが、最後にこのアプローチにより合成が可能になってきた特異な発光性分子の創製に関する成果について述べたい。

**励起状態分子内プロトン移動 (ESIPT) 発光分子系の創製** アルキル鎖の導入による構造修飾が、固体状態の分子配向の制御に限らず、励起状態の構造制御にも有効なことを示した。励起状態における分子内プロトン移動 (excited-state intramolecular proton transfer, ESIPT) に起因する発光の実現である。ESIPT を伴う発光は、異常に大きなストークスシフトや、幅広い波長域での発光帯が実現できる点で魅力的な物性である。しかし、従来の ESIPT 活性な有機色素は、大半が励起状態でのケト-エノール互変異性に基づくものに限られていた。これに対し、水素結合供与能をもつ含ピロール  $\pi$  電子系に対し、水素結合受容能をもつ窒素原子を柔軟なアルキル鎖でくくりつけるという分子設計により、新たな ESIPT 色素 **34** の開発に成功した (ACIE 2014)。この化合物は、励起状態で、プロトン移動前とプロトン移動後の 2 つの準安定な状態をとり、各々から異なる波長で蛍光を示すことにより幅広い波長域をカバーする二重発光特性を示す。これらの 2 つの発光強度比は顕著な溶媒効果を受け、極性を変化させることで、緑色から赤橙色までにわたる顕著な発光色の変化が観測された。この実現の鍵は、電子供与性のピロール  $\pi$  電子系から電子受容性のホウ素部位への分子内 CT 遷移に伴いピロール N-H の酸性が励起状態で増大することであり、予め分子に水素結合をつくっているストラップアミンが脱プロトン化できるようになる。従来の ESIPT 色素とは大きく異なり、水中でも ESIPT による発光が阻害されないことがこの分子系の特徴でもある。また、この構造をさらに修飾することにより二光子励起により、強い深赤色発光を示す分子の開発にもごく最近成功した (論文準備中)。二光子励起および深赤色・近赤外領域での発光は、ともに細胞へのダメージが小さく、また深部領域のイメージングを可能にすることから極めて重要な特性である。



**超耐光性蛍光色素の開発と超解像顕イメージングへの応用** 前述の環境の極性応答性有機リン色素は、脂肪細胞の油滴選択的蛍光プローブとして極めて高い潜在性を示したが、一方で依然重大な問題があった。それが耐光性の問題であり、他の代表的な蛍光色素と比較して相対的には優れた耐光性をもつものの、強い光照射条件下では依然徐々に褪色してしまう。そこで、この素性の良い骨格に、「平面固定化による構造強化」という本プロジェクトで重要性を証明してきたアイデアを導入し、最低一重項励起状態 ( $S_1$ ) からの無輻射失活過程を高度に抑制するとともに、光分解過程に関与すると考えられるオレフィン部位の立体保護を行い、 $S_1$  の安定化を図ることを考えた。実際に合成した化合物 **C-Naphox** は極めて高い耐光性を示した。優れた耐光性で知られる既存の蛍光色素の代表例である Atto 488 が 35%まで分解する光照射条件下においても、99%の初期蛍光強度を維持でき、さらに強レーザー照射を必要とする STED イメージングにおいても、50回の繰り返し観察後も90%以上の蛍光強度を保持できることを実験的に明らかにした(論文投稿中)。超解像顕微鏡の一つである STED 顕微鏡は、数十 nm 程度にまで空間分解能を高められ、その開発はバイオイメージング分野の間違ひなくブレークスルーであったが、従来の有機色素の褪色の速さからその性能が実践的レベルで十分に発揮できていないのが現状である。本成果はこの問題の克服を可能にするものであり、今後、タイムラプス STED イメージングや、3D STED イメージングを可能にする超耐光性色素へと構造最適化することにより、化学の域を超えて生物学の進歩に貢献できるものと期待できる。



(a) C-Naphox と代表的な耐光性蛍光プローブの Xe ランプ照射条件下での耐光性試験, (b) C-Naphox を用いた繰り返し STED 観察における蛍光強度変化。

## § 4 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 0件、国際(欧文)誌 139件)

1. 著者、論文タイトル、掲載誌 巻、号、発行年

・山口グループ (国内(和文)誌 0件、国際(欧文)誌 56件)

1. A. Iida, S. Yamaguchi, "Thiophene-Fused Ladder Boroles with High Antiaromaticity", *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 6952-6955 (2011). (被引用回数 44)
2. A. Fukazawa, E. Yamaguchi, E. Ito, H. Yamada, J. Wang, S. Irle, S. Yamaguchi A. Fukazawa, E. Yamaguchi, E. Ito, H. Yamada, J. Wang, S. Irle, S. Yamaguchi, "Zwitterionic Ladder Stilbenes with Phosphonium and Borate-Bridges: Intramolecular Cascade Cyclization and Structure-Photophysical Properties Relationship", *Organometallics*, **30**, 3870-3879 (2011). (被引用回数 22)
3. A. Bruch, A. Fukazawa, E. Yamaguchi, S. Yamaguchi, A. Studer, "Bis(phosphoryl)-bridged Biphenyls by Radical Phosphanylation: Synthesis, Photophysical and Electrochemical Properties", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **50**, 12094-12098 (2011). (被引用回数 26)
4. S. Saito, K. Nakakura, S. Yamaguchi, "Macrocyclic Restriction with Flexible Alkylene Linkers: A Simple Strategy to Control the Solid-State Properties of  $\pi$ -Conjugated Systems", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, 714-717 (2012). *Selected as a Hot Paper* (被引用回数 18)
5. Z. Zhou, A. Wakamiya, T. Kushida, S. Yamaguchi, "Planarized Triarylboranes: Stabilization by Structural Constraint and Their Plane-to-Bowl Conversion," *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 4529-4532 (2012). *Highlighted in SYNFACTS*, マイナビニュース, 日経産業新聞, 日刊工業, 化学工業日報(被引用回数 58)
6. J. Wang, Y. Wang, T. Taniguchi, S. Yamaguchi, S. Irle, "Substituent Effects on Twisted Internal Charge Transfer Excited States of *N*-borylated Carbazoles and Diphenylaminoboranes", *J. Phys. Chem. A*, **116**, 1151-1158 (2012). (被引用回数 7)
7. A. Iida, A. Sekioka, S. Yamaguchi, "Heteroarene-Fused Boroles: What Governs the Antiaromaticity and Lewis Acidity of the Borole Skeleton?," *Chem. Sci.*, **3**, 1461-1466 (2012). *Highlighted in Chemical Science Blog (RSC Publishing)* (被引用回数 27)
8. Y. Miyata, E. Yoshikawa, T. Minari, K. Tsukagoshi, S. Yamaguchi, "High-Performance Organic Field-Effect Transistors Based on Dihexyl-Substituted Dibenzo[*d,d'*]thieno[3,2-*b*;4,5-*b'*]dithiophene," *J. Mater. Chem.*, **22**, 7715-7717 (2012). (被引用回数 12)
9. T. Araki, A. Wakamiya, K. Mori, S. Yamaguchi, "Elucidation of  $\pi$ -Conjugation Modes in Diarene-Fused 1,2-Dihydro-1,2-diboron Dianions", *Chem. Asian J.*, **7**, 1594-1603 (2012). *Highlighted as an Inside Cover, Selected as a VIP* (被引用回数 2)
10. T. Araki, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, "Electron-Donating Tetrathienyl-Substituted Borole", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, 5484-5487 (2012). (被引用回数 21)
11. K. Mouri, S. Saito, S. Yamaguchi, "Highly Flexible  $\pi$ -Extended Cyclooctatetraenes: Cyclic Thiazole Tetramers with Head-to-Tail Connection", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, 5971-5975 (2012). *Highlighted in SYNFACTS*. (被引用回数 16)
12. S. Saito, K. Matsuo, S. Yamaguchi, "Polycyclic  $\pi$ -Electron System with Boron at Its Center", *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 9130-9133 (2012). *Highlighted as JACS Spotlights, SYNFACTS of the month* (被引用回数 45)
13. K. Nagura, S. Saito, R. Fröhlich, F. Glorius, S. Yamaguchi, "*N*-Heterocyclic Carbene Borane as an Electron Donating and Accepting Component of  $\pi$ -Conjugated Systems", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, 7762-7766 (2012). (被引用回数 23)

14. T. Kushida, Z. Zhou, A. Wakamiya, S. Yamaguchi, "Planarized B-Phenylborataanthracene Anion: Structural and Electronic Impacts of Coplanar-Constraint", *Chem. Commun.*, **48**, 10715-10717 (2012). *Highlighted as a Cover Picture* (被引用回数 12)
15. C. Dou, S. Saito, K. Matsuo, I. Hisaki, S. Yamaguchi, "Boron-Containing PAH as a Substructure of Boron-Doped Graphene", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, 12206-12210 (2012). (被引用回数 37)
16. Z. Hudson, S.-B. Ko, S. Yamaguchi, S. Wang, "Modulating the Photoisomerization of N,C-Chelate Organoboranes with Triplet Acceptors", *Org. Lett.*, **14**, 5610-5613 (2012). (被引用回数 10)
17. T. Taniguchi, J. Wang, S. Irle, S. Yamaguchi, "TICT Fluorescence of *N*-borylated 2,5-Diarylpyrroles: A Gear Like Dual Motion in the Excited State", *Dalton Trans.*, **42**, 620-624 (2013). (被引用回数 13)
18. C. Dou, S. Saito, L. Gao, N. Matsumoto, T. Karasawa, H. Zhang, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, "Sequential Electrophilic and Photochemical Cyclizations from Bis(bithienyl)acetylene to a Tetrathienonaphthalene Core", *Org. Lett.*, **15**, 80-83 (2013). (被引用回数 4)
19. A. Wakamiya, T. Murakami, S. Yamaguchi, "Benzene-Fused BODIPY and Fully-Fused BODIPY Dimer: Impacts of the Ring-Fusing at the *b* Bond in the BODIPY Skeleton", *Chem. Sci.*, **4**, 1002-1007 (2013) (被引用回数 29)
20. A. Fukazawa, H. Oshima, Y. Shiota, S. Takahashi, K. Yoshizawa, S. Yamaguchi, "Thiophene-Fused Bisdehydro[12]annulene that Undergoes Transannular Alkyne Cycloaddition Either by Light or Heat", *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 1731-1734 (2013). *Highlighted in SYNFACTS* (被引用回数 5)
21. A. Iida, S. Saito, T. Sasamori, S. Yamaguchi, "Borylated Dibenzoborepin Synthesized via Skeletal Rearrangement and its Photochromism Based on Bora-Nazarov Cyclization", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, 3760-3764 (2013). *Highlighted in SYNFACTS*. (被引用回数 11)
22. A. Fukazawa, M. Adachi, K. Nakakura, S. Saito, and S. Yamaguchi, "S-Pechmann Dye: A Thiolactone-Containing Organic Dye with Pronounced Electron-Accepting Character and Its Solid-State Photophysical Properties", *Chem. Commun.*, **49**, 7117-7119 (2013). *Highlighted in Back Cover*. (被引用回数 0)
23. C. Glotzbach, U. Kauscher, J. Voskuhl, N. S. Kehr, M. Stuart, R. Fröhlich, H. Galla, B. J. Ravoo, K. Nagura, S. Saito, S. Yamaguchi, E.-U. Würthwein, "Fluorescent Modular Boron Systems based on NNN- and ONO-Tridentate Ligands: Self-Assembly and Cell Imaging", *J. Org. Chem.*, **78**, 4410-4418 (2013). (被引用回数 15)
24. C. Yuan, S. Saito, C. Camacho, S. Irle, I. Hisaki, S. Yamaguchi, "A  $\pi$ -Conjugated System with Flexibility and Rigidity that Shows Environment-Dependent RGB Luminescence", *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 8842-8845 (2013). *Highlighted in C&EN*. (被引用回数 20)
25. C. Dou, S. Saito, S. Yamaguchi, "A Pentacoordinate Boron-Containing  $\pi$ -Electron System with Cl-B-Cl Three-Center Four-Electron Bonds", *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 9346-9349 (2013). (被引用回数 12)
26. T. Kushida, S. Yamaguchi, "Boracyclophanes: Modulation of the  $\sigma/\pi$  Character in Boron-Benzene Interactions", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, 8054-8058 (2013). (被引用回数 3)
27. K. Nagura, S. Saito, H. Yusa, H. Yamawaki, H. Fujihisa, H. Sato, Y. Shimoikeda, S. Yamaguchi, "Distinct Responses to Mechanical Grinding and Hydrostatic Pressure in Luminescent Chromism of Tetrathiazolylthiophene", *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 10322-10325 (2013). (被引用回数 65)

28. T. Kushida, S. Yamaguchi, "A Radical Anion of Structurally Constrained Triphenylborane". *Organometallics*, **32**, 6654-6657 (2013). (被引用回数 13)
29. A. Fukazawa, T. Karasawa, H. Zhang, K. Minemura, C. Camacho, J. Wang, S. Irle, S. Yamaguchi, "Photochemical Double 5-*exo-dig* Cyclization of Alkenyl-substituted Dithienylacetylenes: Efficient Synthesis of Diarylated Dithienofulvalenes", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, 10519-10523 (2013). (被引用回数 2)
30. A. Fukazawa, D. Kishi, Y. Tanaka, S. Seki, S. Yamaguchi, "Diarylated Bi(thieno[2,3-*c*]thiophene)s: A Ring-fusing Strategy for Controlling the Molecular Alignment of Oligoarenes", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, 12091-12095 (2013). (被引用回数 10)
31. K. Mouri, S. Saito, I. Hisaki, S. Yamaguchi, "Thermal  $8\pi$  Electrocyclic Reaction of Heteroarene Tetramers: New Efficient Access to  $\pi$ -Extended Cyclooctatetraenes", *Chem. Sci.*, **4**, 4465-4469 (2013). (被引用回数 0)
32. A. Shuto, T. Kushida, T. Fukushima, H. Kaji, and S. Yamaguchi, " $\pi$ -Extended Planarized Triphenylboranes with Thiophene Spacers," *Org. Lett.*, **15**, 6234-6237 (2013). (被引用回数 12)
33. B. Neue, A. Wakamiya, R. Fröhlich, B. Wibbeling, S. Yamaguchi, and E.-U. Würthwein, "Modification and Unexpected Reactivity of 2-Borylbenzaldimines – Acylated and Silylated Derivatives as well as Dimeric Compounds," *J. Org. Chem.*, **78**, 11747-11755 (2013). (被引用回数 1)
34. C. Yuan, S. Saito, C. Camacho, T. Kowalczyk, S. Irle, and S. Yamaguchi, "Hybridization of a Flexible Cyclooctatetraene Core and Rigid Aceneimide Wings for Multi-Luminescent Flapping  $\pi$  Systems," *Chem. Eur. J.*, **20**, 2193-2200 (2014). *Highlighted as a Inside Cover* (被引用回数 7)
35. T. Kushida, C. Camacho, A. Shuto, S. Irle, M. Muramatsu, T. Katayama, S. Ito, Y. Nagasawa, H. Miyasaka, E. Sakuda, N. Kitamura, Z. Zhou, A. Wakamiya, and S. Yamaguchi, "Constraint-induced Structural Deformation of Planarized Triphenylboranes in the Excited State," *Chem. Sci.*, **5**, 1296-1304 (2014). *Highlighted as a Cover* (被引用回数 10)
36. A. Fukazawa, H. Osaki, and S. Yamaguchi, "Hydroxyphenyl-Substituted Benzophosphole Oxides: Impact of the Intramolecular Hydrogen Bond on the Fluorescence Properties," *Asian J. Org. Chem.*, **3**, 122-127 (2014). (*Special Issue: Pi-Conjugated Compounds for Organic Electronics*). *Highlighted as a Cover* (被引用回数 1)
37. C. Chen, M. Harhausen, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, R. Fröhlich, C. G. Daniliuc, J. L. Petersen, G. Kehr, G. Erker, "The B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>3</sub> Boron Lewis Acid Route to Arene-Annulated Pentalenes," *Chem. Asian J.*, **9**, 1671-1681 (2014). (被引用回数 3)
38. C. -M. Chou, S. Saito, S. Yamaguchi, "Heterotriangulenes  $\pi$ -Expanded at Bridging Positions," *Org. Lett.*, **16**, 2868-2871 (2014). (被引用回数 1)
39. A. Fukazawa, H. Oshima, S. Shimizu, N. Kobayashi, and S. Yamaguchi, "Dearomatization-Induced Transannular Cyclization: Synthesis of Electron-Accepting Thiophene-*S,S*-Dioxide-Fused Biphenylene," *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 8738-8745 (2014). (被引用回数 1)
40. N. Suzuki, A. Fukazawa, K. Nagura, S. Saito, H. Kitoh-Nishioka, D. Yokogawa, S. Irle, S. Yamaguchi, "A Strap Strategy for Construction of an Excited-State Intramolecular Proton Transfer (ESIPT) System with Dual Fluorescence," *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, 8231-8235 (2014). (被引用回数 5)

41. K. Matsuo, S. Saito, and S. Yamaguchi, "Photodissociation of B–N Lewis Adducts: A Partially Fused Trinaphthylborane with Dual Fluorescence," *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 12580-12583 (2014). (被引用回数 9)
42. C.-M. Chou, S. Nobusue, S. Saito, D. Inoue, D. Hashizume, S. Yamaguchi, "Highly Bent Crystals Formed by Restrained  $\pi$ -Stacked Columns Connected via Alkylene Linkers with Variable Conformations," *Chem. Sci.*, **6**, 2354-2359 (2015). (被引用回数 0)
43. E. Yamaguchi, C. Wang, A. Fukazawa, M. Taki, Y. Sato, T. Sasaki, M. Ueda, N. Sasaki, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, "Environment-Sensitive Fluorescent Probe: A Benzophosphole Oxide with an Electron-Donating Substituent," *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 4539-4543 (2015). *Highlighted as a Inside Cover* (被引用回数 2)
44. K. Asai, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, "A Cyclic Octithiophene Containing  $\beta,\beta'$ -Linkages," *Chem. Commun.*, **51**, 6096-6099 (2015). (被引用回数 0)
45. C. Glotzbach, N. Gödeke, R. Fröhlich, C. G. Daniliuc, S. Saito, S. Yamaguchi, E.-U. Würthwein, "Fluorescent Benzene-Centered Mono-, Bis-, and Tris-triazapentadiene-Boron Complexes," *Dalton Trans.* **44**, 9659-9671 (2015). (被引用回数 2)
46. T. Kushida, A. Shuto, M. Yoshio, T. Kato, S. Yamaguchi, "A Planarized Triphenylborane Mesogen: Discotic Liquid Crystals with Ambipolar, Charge-Carrier Transport Properties," *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 6922-6925 (2015). (被引用回数 0)
47. H. Oshima, A. Fukazawa, T. Sasamori, S. Yamaguchi, "A Nonaromatic Thiophene-fused Heptalene and Its Aromatic Dianion," *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 7636-7639 (2015). (被引用回数 0)
48. M. Taki, H. Ogasawara, H. Osaki, A. Fukazawa, Y. Sato, K. Ogasawara, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, "A Red-emitting Ratiometric Fluorescent Probe Based on a Benzophosphole *P*-Oxide Scaffold for the Detection of Intracellular Sodium Ions," *Chem. Commun.*, **51**, 11880-11883 (2015). (被引用回数 0)
49. E. Yamaguchi, A. Fukazawa, Y. Kosaka, D. Yokogawa, S. Irlle, S. Yamaguchi, "A Benzophosphole *P*-Oxide with an Electron-Donating Group at 3-Position: Enhanced Fluorescence in Polar Solvents," *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **88**, 1545-1552 (2015). (被引用回数 1)
50. **S. Kawai, S. Saito, S. Osumi, S. Yamaguchi, A. S. Foster, P. Spijker, E. Meyer, "Atomically-Controlled Substitutional Boron-Doping of Graphene Nanoribbons," *Nat. Commun.*, **6**, 8098 (2015). (被引用回数 0)**
51. C. Wang, A. Fukazawa, M. Taki, Y. Sato, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, "A Phosphole Oxide Based Fluorescent Dye with Exceptional Resistance to Photobleaching: A Practical Tool for Continuous Imaging in STED Microscopy," *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 15213-15217 (2015). (被引用回数 0)
52. S. Osumi, S. Saito, C. Dou, K. Matsuo, K. Kume, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Yamaguchi, "Boron-doped Nanographene: Lewis Acidity, Redox Properties, and Battery Electrode Performance," *Chem. Sci.*, **7**, 219-227 (2016). (被引用回数 1)
53. A. Fukazawa, S. Suda, M. Taki, E. Yamaguchi, M. Grzybowski, Y. Sato, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, "Phospha-fluorescein: A Red-Emissive Fluorescein Analogue with High Photobleaching Resistance," *Chem. Commun.*, **52**, 1120-1123 (2016). (被引用回数 0)
54. H. Iwahara, T. Kushida, S. Yamaguchi, "A Planarized 9-Phenylanthracene: A Simple Electron-Donating Building Block for Fluorescent Materials," *Chem. Commun.*, **52**, 1124-1127 (2016). (被引用回数 0)
55. T. W. Greulich, N. Suzuki, C. G. Daniliuc, A. Fukazawa, E. Yamaguchi, A. Studer, S. Yamaguchi, "A Biphenyl Containing Two Electron-Donating and Two

Electron-Accepting Moieties: A Rigid and Small Donor–Acceptor–Donor Ladder System”, *Chem. Commun.*, 52, 2374-2377 (2016). (被引用回数 0)

56. K. Yuan, N. Suzuki, S. Møllerup, X. Wang, S. Yamaguchi, S. Wang “Pyridyl Directed Catalyst-Free trans-Hydroboration of Internal Alkynes”, *Org. Lett.*, accepted.

•Irle グループ (国内(和文)誌 0件、国際(欧文)誌 83件)

1. Y. Nishimoto, Z. Wang, K. Morokuma, and S. Irle, Molecular and electronic structures of endohedral fullerenes,  $Sc_2C_2@C_{3v}-C_{82}$  and  $Sc_2@C_{3v}-C_{82}$ : Benchmark for SCC-DFTB and proposal of new inner cluster structures, *Phys. status solidi B* **249**, 324-332 (2012) (Thomas Frauenheim Special Issue). (被引用回数 10)
2. J. Wang, Y. Wang, T. Taniguchi, S. Yamaguchi, S. Irle, “Substituent effects on twisted internal charge transfer excited states of N-borylated carbazoles and diphenylaminoboranes”, *J. Phys. Chem. A* **116**(4), 1151-1158 (2012). (被引用回数 7)
3. M. Lundberg, Y. Nishimoto, S. Irle, “Delocalization Errors in a Hubbard-like Model – Consequences for Density-Functional Tight-Binding Calculations of Molecular Systems”, *Int. J. Quant. Chem.* **112**(6), 1701-1711 (2012). (被引用回数 9)
4. J. Jakowski, S. Irle, K. Morokuma, “Time-dependent quantum dynamical simulations of  $C_2$  condensation under extreme conditions”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 6266-6272 (2012). (被引用回数 5)
5. X. Feng, L. Liu, Y. Honsho, A. Saeki, S. Seki, S. Irle, Y. Dong, A. Nagai, D. Jiang, “High-Rate Charge Carrier Transporting Porphyrin Covalent Organic Frameworks: Switching Conducting Nature from Hole to Electron, and to Ambipolar”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 2618-2622 (2012). (被引用回数 77)
6. H. Li, A. J. Page, S. Irle, K. Morokuma, “Theoretical Insights for Chirality-Controlled SWCNT Growth from a Cycloparaphenylene Template”, *Chem. Phys. Chem.* **13**, 1479-1485 (2012). (被引用回数 17)
7. H. Wang, S. Hamanaka, Y. Nishimoto, S. Irle, T. Yokoyama, H. Yoshikawa, K. Awaga, “In Operando X-ray Absorption Fine Structure Studies of Polyoxometalate Molecular Cluster Batteries: Polyoxometalates as Electron Sponge”, *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 4918-4924 (2012). *Highlighted in ChemInform* **43**, 2012 (被引用回数 54)
8. Y. Segawa, A. Fukazawa, S. Matsuura, H. Omachi, S. Yamaguchi, S. Irle, K. Itami, “Combined Experimental and Theoretical Studies on the Photophysical Properties of Cycloparaphenylenes”, *Org. Biomol. Chem.* **10**, 5979-5984 (2012). (被引用回数 56)
9. X. Feng, L. Chen, Y. Honsho, O. Saengsawang, L. Liu, L. Wang, A. Saeki, S. Irle, S. Seki, Y. Dong, D. Jiang, “An Ambipolar Conducting Covalent Organic Framework with Self-Sorted and Periodic Electron Donor-Acceptor Ordering”, *Adv. Mater.* **24**, 3026-3031 (2012). *Highlighted in Nikkan Kougyou Shinbun, Nikkei Sangyou, Kankyō Business, Kagaku (Science) Shinbun, Nikkei Sangyou Shinbun* (被引用回数 58)
10. M. A. Addicoat, A. J. Page, Z. E. Brain, L. Flack, K. Morokuma, S. Irle, “Optimization of a Genetic Algorithm for the Functionalization of Fullerenes”, *J. Chem. Theory Comput.* **8**, 1841-1851 (2012). (被引用回数 6)
11. J. Kim, A. J. Page, S. Irle, K. Morokuma, “Dynamics of Local Chirality during SWCNT Growth: Armchair versus Zigzag Nanotubes”, *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 9311-9319 (2012). (被引用回数 19)

12. J. Jakowski, S. Irle, B. G. Sumpter, K. Morokuma, "Modeling charge transfer in fullerene collisions via real time electron dynamics simulations", *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 1536-1542 (2012). (被引用回数 6)
13. Y. Wang, H.-J. Qian, K. Morokuma, and S. Irle, "Coupled Cluster and Density Functional Theory Studies of Atomic Hydrogen Chemisorption on Pyrene and Coronene as Model Systems for Graphene Hydrogenation", *J. Phys. Chem. A* **116**, 7154-7160 (2012). (被引用回数 18)
14. H.-B. Li, A. J. Page, Y. Wang, S. Irle, K. Morokuma, "Sub-Surface Nucleation of Graphene Precursors Near a Ni(111) Step Edge", *Chem. Commun.* **48**, 7937-7939 (2012). (被引用回数 17)
15. M. Fujihara, Y. Miyata, R. Kitaura, Y. Nishimura, C. Camacho, S. Irle, Y. Iizumi, T. Okazaki, H. Shinohara, "Dimerization-initiated preferential formation of coronene-based graphene nanoribbons in carbon nanotubes", *J. Phys. Chem. C* **116**, 15141-15145 (2012). (被引用回数 33)
16. H.-B. Li, A. J. Page, S. Irle, K. Morokuma, "Single-Walled Carbon Nanotube Growth from Chiral Carbon Nanorings: Prediction of Chirality and Diameter Influence on Growth Rates", *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 15887-15896 (2012). (被引用回数 13)
17. A. J. Page, T. Isomoto, J. M. Knaup, S. Irle, K. Morokuma, "Effects of Molecular Dynamics Thermostats on Descriptions of Chemical Nonequilibrium", *J. Chem. Theory Comput.* **8**(11), 4019-4028 (2012). (被引用回数 4)
18. A. B. Marahatta, M. Kanno, K. Hoki, W. Setaka, S. Irle, H. Kono, "Theoretical Investigation of the Structures and Dynamics of Crystalline Molecular Gyroscopes", *J. Phys. Chem. C* **116**(46), 24845-24854 (2012). (被引用回数 12)
19. A. Paris, N. Verbitskiy, A. Nefedov, Y. Wang, A. V. Fedorov, D. Haberer, M. Oehzelt, L. Petaccia, D. Usachov, D. V. Vyalikh, H. Sachdev, Ch. Wöll, M. Knupfer, B. Büchner, L. Calliari, L. V. Yashina, S. Irle, A. Grüneis, "Kinetic Isotope Effect in the Hydrogenation and Deuteration of Graphene", *Adv. Funct. Mater.* **23**(13), 1628-1635 (2013). (被引用回数 9)
20. C. Camacho, Th. A. Niehaus, K. Itami, S. Irle, "Origin of the size-dependent fluorescence blueshift in [n]cycloparaphenylenes", *Chem. Sci.* **4**(1), 187-195 (2013). (被引用回数 32)
21. T. Taniguchi, J. Wang, S. Irle, S. Yamaguchi, "TICT Fluorescence of N-borylated 2,5-Diarylpyrroles: A Gear Like Dual Motion in the Excited State", *Dalton Trans.*, **42**, 620-624 (2013). (被引用回数 16)
22. S. Qi, H. Iida, L. Liu, S. Irle, W. Hu, E. Yashima, "Electrical Switching Behavior of a [60]Fullerene-Based Molecular Wire Encapsulated in a Syndiotactic Poly(methyl methacrylate) Helical Cavity", *Angew. Chem. Int. Ed.* **52**(3), 1049-1053, (2013). *Featured on Journal Inside Cover* (被引用回数 13)
23. K. R. S. Chandrakumar, J. D. Readle, C. Rouleau, A. A. Puzos, D. B. Geohegan,\* K. More, V. Krishnan, M. Tian, G. Duscher, B. Sumpter, S. Irle, K. Morokuma, "High-Temperature Transformation of Fe-Decorated Single-Wall Carbon Nanohorns to Nanoysters: A Combined Experimental and Theoretical Study", *Nanoscale* **5**, 1849-1857 (2013). *Featured on Journal Cover* (被引用回数 5)
24. X. Chen, M. Addicoat, S. Irle, A. Nagai, D. Jiang, "Control of Crystallinity and Porosity of Covalent Organic Frameworks by Managing Interlayer Interactions Based on Self-Complementary  $\pi$ -Electronic Force", *J. Am. Chem. Soc.* **135**(2), 546-549 (2013). (被引用回数 41)
25. S. Jin, X. Ding, X. Feng, M. Supur, K. Furukawa, S. Takahashi, M. A. Addicoat, M. E. El-Khouly, T. Nakamura, S. Irle, S. Fukuzumi, A. Nagai, D. Jiang, "Charge Dynamics in A Donor-Acceptor Covalent Organic Framework with Periodically Ordered

- Bicontinuous Heterojunctions”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52**(7), 2017-2021 (2013). *Featured on Journal Inside Cover* (被引用回数 47)
26. A. J. Page, C.-P. Chou, B. Q. Pham, H. A. Witek, S. Irle, K. Morokuma, “Quantum Chemical Investigation of Epoxide and Ether Groups in Graphene Oxide and Analysis of Vibrational Spectra”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**(11), 3725-3735 (2013). (被引用回数 14)
  27. K. R. S. Chandrakumar, A. J. Page, S. Irle, K. Morokuma, “Carbon Coating Precedes SWCNT Nucleation on Silicon Nanoparticles: Insights from QM/MD Simulations”, *J. Phys. Chem. C* **117**(8), 4238-4244 (2013). (被引用回数 5)
  28. C. Yuan, S. Saito, C. Camacho, S. Irle, I. Hisaki, S. Yamaguchi, “A  $\pi$ -Conjugated System with Flexibility and Rigidity that Shows Environment-Dependent RGB Luminescence”, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 8842-8845 (2013). *Highlighted in C&EN*. (被引用回数 26)
  29. A. J. Page, Y. Wang, H.-B. Li, S. Irle, K. Morokuma, “Nucleation of Graphene Precursors on Transition Metal Surfaces: Insights from Theoretical Simulations”, *J. Phys. Chem. C* **117**(28), 14858-14864 (2013). (被引用回数 12)
  30. H.-B. Li, A. J. Page, S. Irle, K. Morokuma, “Revealing the Dual Role of Hydrogen for Growth Inhibition and Defect Healing in Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Formation: QM/MD Simulations”, *J. Phys. Chem. Lett.* **4**(14), 2323-2327 (2013). (被引用回数 4)
  31. M. A. Addicoat, Y. Nishimura, T. Sato, T. Tsuneda, S. Irle, “Stochastic Search of Molecular Cluster Interaction Energy Surfaces with Coupled Cluster Quality Prediction. The Phenylacetylene Dimer”, *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 3848-3854 (2013). (被引用回数 2)
  32. A. Fukazawa, T. Karasawa, H. Zhang, K. Minemura, C. Camacho, J. Wang, S. Irle, S. Yamaguchi, “Photochemical Double *5-exo-dig* Cyclization of Alkenyl-substituted Dithienylacetylenes: Efficient Synthesis of Diarylated Dithienofulvalenes”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **52**(40), 10519-10523 (2013). *Highlighted in ChemInform 45, 2014* (被引用回数 6)
  33. M. A. Addicoat, S. Fukuoka, A. J. Page, S. Irle, “Stochastic structure determination for conformationally flexible heterogeneous molecular clusters. Application to ionic liquids”, *J. Comput. Chem.* **34**, 2591-2600 (2013). *Featured on Journal Cover* (被引用回数 15)
  34. H.-B. Li, A. J. Page, S. Irle, K. Morokuma, Temperature Dependence of the Catalyst-Free Chirality-Controlled Single-Walled Carbon Nanotube Growth from Organic Templates, *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 3176-3180 (2013). (被引用回数 4)
  35. **H. E. Lim, Y. Miyata, R. Kitaura, Y. Nishimura, Y. Nishimoto, S. Irle, J. H. Warner, H. Kataura, H. Shinohara, Growth of carbon nanotubes via twisted graphene nanoribbons, *Nature Commun.* **4**, 2548/1-7 (2013). *Open access* (被引用回数 20)**
  36. M. Morita, W. Norimatsu, H.-J. Qian, S. Irle, M. Kusunoki, Atom-by-atom simulations of graphene growth by decomposition of SiC (0001): Impact of the substrate steps, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 141602/1-4 (2013). (被引用回数 10)
  37. S. Jin, K. Furukawa, M. Addicoat, L. Chen, S. Takahashi, S. Irle, T. Nakamura, D. Jiang, Large pore donor-acceptor covalent organic frameworks, *Chem. Sci.* **4**, 4505-4511 (2013). (被引用回数 19)
  38. Y. Nishimura, J. Saito, D. Yokogawa, C.-P. Chou, H. A. Witek, S. Irle, Two mutually exclusive DFTB parameter sets for simulation of chemical hydrogen sputtering on beryllium walls, in: 2. Coordinated Research Projects, *J. Plasma Fusion Res.* **89**(9),

- 583-599 (2013), Chapter 2.7. *Special Topics Articles on IAEA Coordination Research Projects (CRPs)* (被引用回数 0)
39. J. Guo, Y. Xu, S. Jin, L. Chen, T. Kaji, Y. Honsho, M. A. Addicoat, J. Kim, A. Saeki, H. Ihee, S. Seki, S. Irle, M. Hiramoto, J. Gao, D. Jiang, **Conjugated organic framework with three-dimensionally ordered stable structure and delocalized  $\pi$  clouds**, *Nature Commun.* **4**, 2548/1-7 (2013). *Open access. Highlighted in Synfacts 10(2), 0147 (2014)* (被引用回数 50)
  40. Y. Wang, A. J. Page, H.-B. Li, H.-J. Qian, M.-G. Jiao, Z.-J. Wu, K. Morokuma, S. Irle, Step-edge self-assembly during graphene nucleation on a nickel surface: QM/MD simulations, *Nanoscale (Communication)* **6**, 140-144 (2014). (被引用回数 14)
  41. C. Wongchoosuk, Y. Wang, T. Kerdcharoen, S. Irle, Nonequilibrium Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of C<sub>60</sub> to SiC Heterofullerene Conversion, *Carbon* **68**, 285-295 (2014). (被引用回数 0)
  42. T. Kushida, C. Camacho, A. Shuto, S. Irle, M. Muramatsu, T. Katayama, S. Ito, Y. Nagasawa, H. Miyasaka, E. Sakuda, N. Kitamura, Z. Zhou, A. Wakamiya, S. Yamaguchi, Constraint-induced structural deformation of planarized triphenylboranes in the excited state, *Chem. Sci.* **5**(4), 1296-1304 (2014). *Featured on Journal Front Cover* (被引用回数 14)
  43. H. Xu, X. Chen, J. Gao, J. Lin, M. Addicoat, S. Irle, D. Jiang, Catalytic covalent organic frameworks via pore surface engineering, *Chem. Commun.* **50**, 1292-1294 (2014). *Featured on Journal Back Cover* (被引用回数 54)
  44. C. Yuan, S. Saito, C. Camacho, T. Kowalczyk, S. Irle, S. Yamaguchi, Hybridization of a Flexible Cyclooctatetraene Core and Rigid Aceneimide Wings for Multiluminescent Flapping  $\pi$  Systems, *Chem. Eur. J.* **20**(8), 2193-2200 (2014). *Featured on Journal Inside Cover. Highlighted in the ACS online publication "Noteworthy Chemistry", April 14, 2014, and in Synfacts 10(5), 0477 (2014)* (被引用回数 10)
  45. Y. Wang, X. Gao, H.-J. Qian, Y. Ohta, X. Wu, G. Eres, K. Morokuma, S. Irle, Quantum chemical simulations reveal acetylene-based growth mechanisms in the chemical vapor deposition synthesis of carbon nanotubes, *Carbon* **72**, 22-37 (2014). *Highlighted between March 31 and April 3, 2014 as "Carbon nanotubes grow in combustion flames" in ResearchSEA, nanowork, EurekAlert!, Phys.Org, Science Daily, Wallstreeter (March 31, 2014), News, UnFox News, Science Codex, Physics News, regator, Jersey Tribune, Technobahn, USA News, DailyMe, News Dump, Science Seeker, Organic Electronic News, News Locker, Press News, R&D Magazine, Product Design & Development, Nanotechnology Now, Bright Surf, e! Science News, Brunch News, veooz, Dallas Sun, Science Newslite, Nets247, ORNL in the News (April 1, 2014), Red Orbit, A Natural Cure, Science Recorder (April 2, 2014), Space Daily (April 3, 2014).* (被引用回数 6)
  46. N. Ogasawara, W. Norimatsu, S. Irle, M. Kusunoki, Growth mechanisms and selectivity for graphene or carbon nanotube on SiC(000-1): A density-functional tight-binding molecular dynamics study, *Chem. Phys. Lett.* **595-596**, 266-271 (2014). (被引用回数 4)
  47. M. Jiao, H. Qian, A. J. Page, K. Li, Y. Wang, Z. Wu, S. Irle, K. Morokuma, Graphene Nucleation from Amorphous Nickel Carbides: QM/MD Studies on the Role of Subsurface Carbon Density, *J. Phys. Chem. C* **118**, 11078-11084 (2014). (被引用回数 5)
  48. Y. Sado, S. Aoyagi, N. Izumi, R. Kitaura, T. Kowalczyk, J. Wang, S. Irle, E. Nishibori, K. Sugimoto, H. Shinohara, Structure of Tm<sub>2</sub> and Tm<sub>2</sub>C<sub>2</sub> Encapsulated in Low-Symmetry C<sub>82</sub>(C<sub>s</sub>(6)) Fullerene Cage by Single Crystal X-ray Diffraction, *Chem. Phys. Lett.* **600**, 38-42 (2014). (被引用回数 2)

49. Y. Nishimura, D. Yokogawa, S. Irle, Theoretical study of cellobiose hydrolysis to glucose in ionic liquids, *Chem. Phys. Lett.* **603**, 7-12 (2014). (被引用回数 7)
50. Y. Nishimoto, H. Yoshikawa, K. Awaga, M. Lundberg, S. Irle, Theoretical investigation of molecular and electronic structure changes of the molecular magnet Mn<sub>12</sub> cluster upon super-reduction, *Phys. status solidi RRL* **8**(6), 517-521 (2014). *Part of a Focus Issue on "Functional Oxides". Featured on Journal Back Cover.* (被引用回数 1)
51. S. Jin, T. Sakurai, T. Kowalczyk, S. Dalapati, F. Xu, H. Wei, X. Chen, J. Gao, S. Seki, S. Irle, D. Jiang, Two-Dimensional Tetrathiafulvalene Covalent Organic Frameworks: Towards Latticed Conductive Organic Salts, *Chem. Eur. J.* **20**, 14608-14613 (2014). *Featured on Journal Back Cover* (被引用回数 13)
52. H.-B. Li, A. Page, Ch. Hettich, B. Aradi, Ch. Kohler, Th. Frauenheim, S. Irle, K. Morokuma, Graphene nucleation on a surface-molten copper catalyst: quantum chemical molecular dynamics simulations, *Chem. Sci.* **4**, 3493-3500 (2014). (被引用回数 4)
53. P. Kamsri, A. Punkvang, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, S. Irle, P. Pungpo, Elucidating the structural basis of diphenyl ether derivatives as highly potent enoyl-ACP reductase inhibitors through molecular dynamics simulations and 3D-QSAR study, *J. Mol. Model.* **20**, 2319/1-12 (2014). (被引用回数 1)
54. N. Suzuki, A. Fukazawa, K. Nagura, S. Saito, H. Kitoh-Nishioka, D. Yokogawa, S. Irle, S. Yamaguchi, A Strap Strategy for Construction of an Excited-State Intramolecular Proton Transfer (ESIPT) System with Dual Fluorescence, *Angew. Chem. Int. Ed.* **126**(31), 8370-8374 (2014). (被引用回数 7)
55. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Irle, Super-reduced polyoxometalates: Excellent molecular cluster battery components and semipermeable molecular capacitors, *J. Am. Chem. Soc.* **136**(25), 9042-9052 (2014). (被引用回数 15)
56. V. S. Reddy, C. Camacho, J. Xia, R. Jasti, S. Irle, Quantum dynamics simulations reveal vibronic effects on the optical properties of [n]cycloparaphenylenes, *J. Chem. Theory Comput.* **10**, 4025-4036 (2014). (被引用回数 9)
57. S. Mazzucco, Y. Wang, M. Tanase, M. Picher, K. Li, Z. Wu, S. Irle, R. Sharma, Direct evidence of active and inactive phases of Fe catalyst nanoparticles for carbon nanotube formation, *J. Catalysis* **319**, 54-60 (2014). (被引用回数 7)
58. Y. Nishimura, Y.-P. Lee, S. Irle, H. A. Witek, Critical interpretation of CH- and OH-stretching regions for infrared spectra of methanol clusters (CH<sub>3</sub>OH)<sub>n</sub> (n = 2-5) using self-consistent-charge density functional tight-binding molecular dynamics simulations, *J. Chem. Phys.* **141**(9), 094303/1-11 (2014). (被引用回数 1)
59. P. Goyal, H.-J. Qian, S. Irle, X. Liu, D. Roston, T. Mori, M. Elstner, Q. Cui, Molecular Simulation of Water and Hydration Effects in Different Environments: Challenges and Developments for DFTB Based Models, *J. Phys. Chem. B* **118**(38), 11007-11027 (2014). *Feature Article, featured on Journal Cover* (被引用回数 11)
60. Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, S. Irle, Density-Functional Tight-Binding Combined with the Fragment Molecular Orbital Method, *J. Chem. Theory Comput.* **10**(11), 4801-4812 (2014). *Featured on Journal Cover. Highlighted between December 4 and December 15, 2014 as "Ultrafast complex molecular simulations by 'cutting up molecules'" in various online science news websites* (被引用回数 8)
61. B. Liu, J. Liu, H.-B. Li, R. Bhola, E. A. Jackson, L. T. Scott, A. Page, S. Irle, K. Morokuma, C. Zhou, Nearly Exclusive Growth of Small Diameter Semiconducting Single-Wall Carbon Nanotubes from Organic Chemistry Synthetic End-Cap Molecules, *Nano Lett.* **15**(1), 586-595 (2015). (被引用回数 6)

62. A. J. Page, F. Ding, S. Irle, K. Morokuma, Insights into carbon nanotube and graphene formation mechanisms from molecular simulations: a review, *Rep. Prog. Phys.* **78**, 036501/1-38 (2015). (被引用回数 9)
63. A. Punkvang, P. Kamsri, P. Saparpakorn, S. Hannongbua, P. Wolschann, S. Irle, P. Pungpo, Key Structures and Interactions for Binding of Mycobacterium tuberculosis Protein Kinase B Inhibitors from Molecular Dynamics Simulation, *Chem. Biol. Drug Des.* **86** 91-101 (2015). (被引用回数 0)
64. X. Chen, M. Addicoat, E. Jin, L. Zhai, H. Xu, N. Huang, Z. Guo, L. Liu, S. Irle, D. Jiang, Locking Covalent Organic Frameworks with Hydrogen Bonds: General and Remarkable Effects on Crystalline Structure, Physical Properties, and Photochemical Activities, *J. Am. Chem. Soc.* **137**(9), 3241–3247 (2015). (被引用回数 10)
65. H. E. Lim, Y. Miyata, M. Fujihara, S. Okada, Z. Liu, Arifin, K. Sato, H. Omachi, R. Kitaura, S. Irle, K. Suenaga, H. Shinohara, Fabrication and Optical Probing of Highly-Extended, Ultrathin Graphene Nanoribbons in Carbon Nanotubes, *ACS Nano* **9**(5), 5034-5040 (2015). Highlighted on April 27, 2015 as “Nanoribbons get smaller” at nanotechweb.org and other websites. (被引用回数 1)
66. T. Oshima, I. Yamanaka, A. Kumar, J. Yamaguchi, T. Nishiwaki-Ohkawa, K. Muto, R. Kawamura, T. Hirota, K. Yagita, S. Irle, S. A. Kay, T. Yoshimura, K. Itami, C–H Activation Generates Period-Shortening Molecules That Target Cryptochrome in the Mammalian Circadian Clock, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54**(24), 7193-7397 (2015). *Featured on Journal Back Cover. Highlighted between June 9 and June 19, 2015 as “Small molecules change biological clock rhythm” in various online science news websites.* (被引用回数 7)
67. S. Jin, M. Supur, M. A. Addicoat, K. Furukawa, L. Chen, T. Nakamura, S. Fukuzumi, S. Irle, Donglin Jiang, Creation of Superheterojunction Polymers via Direct Polycondensation: Segregated and Bicontinuous Donor-Acceptor  $\pi$ -Columnar Arrays in Covalent Organic Frameworks for Long-Lived Charge Separation, *J. Am. Chem. Soc.* **137**(24), 7817-7827 (2015). (被引用回数 0)
68. **S. Dalapati, M. Addicoat, S. Jin, T. Sakurai, J. Gao, S. Irle, S. Seki, D. Jiang, Rational design of crystalline supermicroporous covalent organic frameworks with triangular topologies, *Nature Commun.* **6**, 7786 (2015).** (被引用回数 5)
69. A. J. Page, S. Saha, H-B. Li, S. Irle, K. Morokuma, Quantum Chemical Simulation of Carbon Nanotube Nucleation on Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalysts via CH<sub>4</sub> Chemical Vapor Deposition, *J. Am. Chem. Soc.* **137**(29), 9281-9288 (2015). (被引用回数 0)
70. J. W. Lee, T. Hirota, A. Kumar, S. Irle, S. A. Kay, Development of Small Molecule Cryptochrome Stabilizer Derivatives as Modulators of the Circadian Clock, *Chem. Med. Chem.*, **10**, 1489-1497 (2015). *Featured on Journal Front Cover* (被引用回数 1)
71. Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, S. Irle, Third-order density-functional tight-binding combined with the fragment molecular orbital method, *Chem. Phys. Lett.* **636**, 90-96 (2015). (被引用回数 1)
72. H. A. Witek, C-P. Chou, G. Mazur, Y. Nishimura, S. Irle, Th. Frauenheim, and K. Morokuma, Automatized Parameterization of the density-functional tight-binding method. II. Two-center Integrals, *J. Chin. Chem. Soc.*, **63**, 57-68 (2016). (被引用回数 0)
73. E. Yamaguchi, A. Fukazawa, Y. Kosaka, D. Yokogawa, S. Irle, S. Yamaguchi, A Benzophosphole Oxide with an Electron-Donating Group at the 3-Position: Enhanced Fluorescence in Polar Solvents, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **88**, 1545-1552 (2015). (被引用回数 1)
74. X. Chen, M. Addicoat, E. Jin, H. Xu, T. Hayashi, F. Xu, N. Huang, S. Irle, D. Jiang, Designed synthesis of double-stage two-dimensional covalent organic frameworks, *Sci.*

- Rep.* **5**, 14650/1-19 (2015). (被引用回数 0)
75. Y. Nishimoto, H. Nakata, D. G. Fedorov, S. Irle, Large-Scale Quantum-Mechanical Molecular Dynamics Simulations Using Density-Functional Tight-Binding Combined with the Fragment Molecular Orbital Method, *J. Chem. Phys. Lett.* **6**(24), 5034-5039 (2015). (被引用回数 0)
  76. K. Usui, M. Ando, D. Yokogawa, S. Irle, Understanding the On-Off Switching Mechanism in Cationic Tetravalent Group-V-Based Fluoride Molecular Sensors Using Orbital Analysis, *J. Phys. Chem. A* **119**(51), 12693-12698 (2015). (被引用回数 0)
  77. Arifin, M. Puripat, D. Yokogawa, V. Parasuk, S. Irle, Glucose transformation to 5-hydroxymethylfurfural in acidic ionic liquid: A quantum mechanical study, *J. Comput. Chem.* **37**(3), 327-335 (2016). (被引用回数 0)
  78. C.-P. Chou, Y. Nishimura, C.-C. Fan, G. Mazur, S. Irle, H. A. Witek, Automated Parameterization of DFTB using Particle Swarm Optimization, *J. Chem. Theory Comput.* **12**(1), 53-64 (2016). (被引用回数 0)
  79. M. Jiao, W. Song, H.-J. Qian, Y. Wang, Z. Wu, S. Irle, Keiji Morokuma QM/MD studies on graphene growth from small islands on the Ni(111) surface, *Nanoscale* **8**(5), 3067-3074 (2016). (被引用回数 0)
  80. T. Kowalczyk, K. Le, S. Irle, Self-Consistent Optimization of Excited States Within Density-Functional Tight-Binding, *J. Chem. Theory Comput.* **12**(1), 313-323 (2016). (被引用回数 0)
  81. H. A. Witek and S. Irle, Diversity in electronic structure and vibrational properties of fullerene isomers correlates with cage curvature, *Carbon* **100**, 484-494 (2016). (被引用回数 0)
  82. Q. Deng, Th. Heine, S. Irle, A. A. Popov, Self-assembly of endohedral metallofullerenes: a decisive role of cooling gas and metal-carbon bonding, *Nanoscale* **8**(6), 3796-3808. (2016). (被引用回数 0)
  83. S. Ito, S. Irle, Y. Okamoto, Implementation of replica-exchange umbrella sampling to DFTB+ simulation package, *Comp. Phys. Commun.* Accepted (2016). (被引用回数 0)

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

1. 詳細情報

・山口グループ

1. S. Yamaguchi, A. Fukazawa, “Synthetic Study of Novel  $\pi$ -Electron Materials Containing Boron, Nitrogen, and Phosphorus as a Key Main Group Elements”, *有機合成化学協会誌*, **69**, 661-670 (2011).
2. 深澤愛子, 山口茂弘, ”機能性材料への応用”, 現代ケイ素化学, 吉良満夫, 玉尾皓平編, 化学同人, pp. 333-347 (2013).
3. 山口茂弘, ”典型元素を鍵とする光・電子機能性 $\pi$ 電子系の開発”, *化学と工業*, **87**, 206-212 (2013).
4. 山口茂弘, “典型元素が鍵を握る $\pi$ 電子系化学”, CSJカレントレビュー「未来材料を創出する $\pi$ 電子系の化学：新しい合成・構造・機能化に向けて」, 化学同人, 112-119 (2013).
5. 山口茂弘, ”ホウ素を含む $\pi$ 電子系の創製”, 高次 $\pi$ 空間の創発と機能開発, シー・エム・シー出版, pp. 68-72 (2013).

6. A. Wakamiya and S. Yamaguchi, "Designs of Functional  $\pi$ -Electron Materials based on the Characteristic Features of Boron," *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, Advance Publication (2015).
7. S. Yamaguchi, "Boron-Containing  $\pi$ -Electron Systems", *Chemical Science of  $\pi$ -Electron Systems*, T. Akasaka, A. Osuka, S. Fukuzumi, H. Kandori, Y. Aso, Eds., Springer Japan, 2015, Chapter 21, pp. 364-377.

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 25 件、国際会議 74 件)

1. 山口茂弘, 「光電子機能性有機ホウ素材料の創製」, 第98回有機合成シンポジウム, 有機合成化学協会, 東京, 2010年11月6日.
2. 山口茂弘, 「エレクトロニクスデバイス用パイ共役分子の開発」, JCI 第9回機能性材料分科会講演会, 東京, 2010年12月6日.
3. 山口茂弘, 「マテリアルを指向した有機ホウ素化学」, 岡山理科大学第3回グリーン元素科学シンポジウム, 岡山, 2010年12月10日.
4. 山口茂弘, 「典型元素化学を基盤とした新規機能性 $\pi$ 電子系の創製研究」, 九州大学グローバルCOEプログラム 第135回 G-COE セミナー, 九州大学, 2011年2月3日.
5. 山口茂弘, 「ユニークな $\pi$ 電子系をいかにつくるか」, 埼玉大学大学院理工学研究科講演会, 埼玉大学, 2011年7月15日.
6. 山口茂弘, 「ユニークな $\pi$ 電子系をいかにつくるか」, 関西学院大学大学院理工学研究科講演会, 関西学院大学, 2011年9月1日.
7. 山口茂弘, 「新奇的な $\pi$ 電子系のデザイン」, 日本学術振興会116委員会神奈川地区講演会, 川崎, 2011年11月22日.
8. 山口茂弘, 「光・電子機能性分子の新デザイン」, 日本化学会第93春季年会, 慶應義塾大学, 2012年3月25日.
9. 山口茂弘, 「ユニークな $\pi$ 電子系をいかに創るか」, 京都大学理学研究科講演会, 京都大学, 2012年6月5日.
10. 山口茂弘, 「ユニークな $\pi$ 電子系をいかに創るか」, 広島大学工学研究科講演会, 広島大学, 2013年1月25日.
11. 山口茂弘, 「有機フォトルミネッセンスに向けた精密分子設計」, 日本化学会春季年会, 立命館大学, 2013年3月25日.
12. 山口茂弘, 「ユニークな $\pi$ 電子系をいかに創るか」, 大阪府立大学工学研究科集中講義講演会, 大阪府立大学, 2013年7月12日.
13. 山口茂弘, 「ユニークな $\pi$ 電子系をいかに創るか」, 神奈川大学理学研究科講演会, 神奈川大学, 2013年7月26日.
14. 山口茂弘, 「ユニークな $\pi$ 電子系をいかに創るか」, 錯体化学夏の学校若手の会, 札幌, 2013年8月11日.
15. 山口茂弘, 「光機能性 $\pi$ 骨格の新デザイン」, 日本化学会第94春季年会, 名古屋大学, 2014年3月30日.
16. 山口茂弘, 光電子機能性分子のユニークなデザイン, 第26回万有札幌シンポジウム 有機合成化学の挑戦, 北海道大学, 2014年7月5日.
17. 山口茂弘, 光る分子をデザインする, 国際有機化学財団シンポジウム, 出雲, 2014年10月11日.

18. 山口 茂弘, 発光分子の精密デザイン, 第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014, 東京, 2014 年 10 月 14-16 日.
19. 山口茂弘, 光る分子をデザインする, 半田高校 SSH「知多で学ぶ サイエンスコミュニケーション」半田, 2015 年 2 月 7 日.
20. 山口茂弘, 「光・電子機能性分子のユニークなデザイン」, 有機合成化学講演会「合成有機化学のフロンティア」, 2015 年 5 月 15 日, 福岡
21. 山口茂弘, 「ユニークな光・電子機能性分子を求めて」, 東京工業大学集中講義講演会, 2015 年 7 月 19 日, 東京.
22. 山口茂弘, 「光・電子機能性分子のユニークなデザイン」, 第 32 回有機合成セミナー向山賞受賞講演, 2015 年 9 月 15-17 日, 湯河原.
23. 山口茂弘, 「典型元素の活用と構造固定に基づいた光・電子機能性  $\pi$  電子系の創出」, 日本化学第 96 春季年会 2016, 学術賞受賞講演, 2016 年 3 月 26 日, 同志社大学京田辺キャンパス.
24. **S. Irle**, “*Changes in Molecular and Electronic Structure of Metal Oxide Clusters in Batteries During Charging and Discharging*”, TCCI 3<sup>rd</sup> Symposium for Communicating with Experimental Chemists, Fukui Institute of Fundamental Chemistry, Kyoto University, Kyoto, Japan, November 5-6, 2013.
25. **S. Irle**, “*Game-Changing Influence of Excited States Dynamics for Photoemission Properties of  $\pi$ -Conjugated Molecular Dyes*”, Supercomputer Workshop 2014, Okazaki Conference Hall, Okazaki, Japan, January 10-11, 2014.

〈国際〉

1. S. Yamaguchi, “*Chemistry of Novel Fused  $\pi$ -Electron Materials*”, International Symposium on Novel Planar Organic Materials, National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan, October 9, 2010.
- \*2. S. Yamaguchi, “*Boron-Containing  $\pi$ -Electron Materials*”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010), Honolulu, Hawaii, USA, December 17, 2010.
3. S. Yamaguchi, “*Chemistry of Boron-Containing  $\pi$ -Electron Materials*”, Campus Asia Meeting, Shanghai, March 10–12, 2011.
- \*4. S. Yamaguchi, “*New  $\pi$ -Conjugated Skeletons Constructed by New Acetylene Cyclizations*”, 23rd International Conference of Heterocyclic Chemistry, Glasgow, UK, July 31-August 4, 2011.
- \*5. S. Yamaguchi, “*Boracyclic  $\pi$ -Conjugated Compounds*”, The XIVth International Conference on Boron Chemistry (IME Boron XIV), Niagara Falls, Canada, September 11-15, 2011.
6. S. Yamaguchi, “*Fused Polycyclic  $\pi$ -Conjugated Skeletons with Unusual Electronic Structures*”, Department Seminars, Queen’s University, Kingston, Canada, September 16, 2011.
7. S. Yamaguchi, “*Organoboron Materials with Unique Electronic and Structural Features*”, The 15th Korea-Japan Seminar on Organic Chemistry, Gyeongju, Korea, September 30-October 3, 2011.
8. S. Yamaguchi, “*Polycyclic Organoboron Materials with Unusual Electronic Structures*”, The 15th Korea-Japan Joint Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry for Renewable Energy Research, Jeju, Korea, October 6-8, 2011.
9. S. Yamaguchi, “*Boracyclic  $\pi$ -Conjugated Compounds with Unusual Electronic Structures*”, International Symposium on Functional  $\pi$ -Electron Systems, Beijing, China, October 13-17, 2011.

10. S. Yamaguchi, "*Boron-Containing  $\pi$ -Conjugated Materials with Unusual Electronic Properties*", Pre-ISOR 2011 Japan-Taiwan Joint Symposium on Organic Chemistry, Kyoto, November 20-21, 2011.
11. S. Yamaguchi, "*Boracycle-based  $\pi$ -Conjugated Molecules*", 1st International Symposium on Creation of Functional Materials, Tsukuba University, December 17-18, 2011.
12. S. Yamaguchi, "*Design and Synthesis of New Functional  $\pi$ -Electron Materials*", University of Strasbourg, France, May 4, 2012.
13. S. Yamaguchi, "*Designs and Synthesis of Novel  $\pi$ -Electron Materials with Intriguing Structures*", 13rd IRTG Joint Symposium, University of Münster and Nagoya University, Münster, Germany, May 7, 2012.
14. S. Yamaguchi, "*Design and Synthesis of Novel  $\pi$ -Electron Materials with Intriguing Structures*", University of Toronto, Canada, June 14, 2012.
15. S. Yamaguchi, "*Novel Functional  $\pi$ -Electron Materials with Intriguing Structures, Shandong University*", China, June 22, 2012.
16. S. Yamaguchi, "*Main Group Elements-Based  $\pi$  Chemistry: New Reactions for New  $\pi$ -Conjugated Skeletons*", Jilin University, China, July 6, 2012.
17. S. Yamaguchi, "*Main Group Elements-Based  $\pi$  Chemistry: New Concepts for Designing New  $\pi$ -Conjugated Skeletons*", Jilin University, China, July 9, 2012.
18. S. Yamaguchi, "*Novel Thiophene and Thiazole-Based  $\pi$ -Electron Materials*", International Union of Materials Research Sciences – International Conference on Electronic Materials 2012, Yokohama, Japan, September 23-28, 2012.
19. S. Yamaguchi, "*Some Interesting Organoboron Materials*", 7th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules, Hsinchu, Taiwan, October 21, 2012.
20. S. Yamaguchi, "*Some Reactive Organoboron Compounds for Materials*", 1st International Symposium on Stimuli-Responsive Chemical Species, Hiroshima, Japan, March 27, 2013.
- \*21. S. Yamaguchi, "*Chemistry of Some Intriguing Organoboron Materials*", ACS Award for Creative Invention: Symposium in Honor of Timothy M. Swager. ACS 245th National Meeting, New Orleans, Louisiana, April 7-11, 2013.
- \*22. S. Yamaguchi, "*Chemistry of Planarized Triarylboranes and Related Compounds*", The 1st International Symposium on Aggregation-Induced Emission, Wuhan, China, May 17-20, 2013.
- \*23. S. Yamaguchi, "*Functional  $\pi$ -Materials with Rigidity and Flexibility*", 5th Gratama Workshop 2013, Tokyo, Japan, May 29–June 1, 2013.
- \*24. S. Yamaguchi, "*New  $\pi$ -Conjugated Skeletons with Rigidity and Flexibility*", The 15th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-15), Taipei, Taiwan, July 28-August 2, 2013
25. S. Yamaguchi, "*Functional  $\pi$  Materials with Rigidity and Flexibility*," The 16th Japan-Korea Seminar on Organic Chemistry, Sendai, September 27-29, 2013
- \*26. S. Yamaguchi, "*Functional  $\pi$  Materials with Rigidity and Flexibility*," ACS Excellence in Science Symposium: The Journal of Organic Chemistry and Organic Letters, Shanghai, China, October 15-16, 2013
27. S. Yamaguchi, " *$\pi$ -conjugated systems with photochromic and dynamic functions*," The 16th Joint Seminar: University of Münster-Nagoya University, November 11–12, 2013
28. S. Yamaguchi, "*Functional  $\pi$ -materials with rigidity and flexibility*," Univ. of Erlangen-Nuernberg, November 14, Erlangen, Germany

- \*29. S. Yamaguchi, "Bora-Nazarov Reaction: The Quest for Photochromic Function of Organoboron Materials," The International Symposium on Organic Reaction (ISOR-11), November 23-24, 2013, Taipei
30. S. Yamaguchi, "Functional p Materials with Rigidity and Flexibility," Post ISOR Symposium 2013, November 23-24, 2013, Taipei
31. S. Yamaguchi, "Functional p Materials with Rigidity and Flexibility," National University of Singapore, December 12, 2013, Singapore
32. S. Yamaguchi, "Functional p Materials with Rigidity and Flexibility," Nanyang Technological University, December 13, 2013, Singapore
- \*33. S. Yamaguchi, Main Group Strategy for Electronic and Photochemical Functions, The 17th International Symposium on Silicon Chemistry (ISOS XVII Berlin 2014), Berlin, August 3-8, 2014. (*Plenary lecture*)
34. S. Yamaguchi, Excited State Design of Photo-functional Molecules, Germany-Japan Bilateral Meeting on Organic Synthesis and Materials, Berlin, September 8-10, 2014.
35. S. Yamaguchi, Main Group Strategy for Photo- & Electro-Functional Molecules, IGER Workshop on Molecular Electronics for Young Researchers, Nagoya University, October 21, 2014.
36. S. Yamaguchi, Chemistry of Boron-doped Graphene Flakes, The 16th Japan-Korea Joint Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry, Sendai, Japan, October 23-25, 2014.
37. S. Yamaguchi, Main Group Strategy for Photo- and Electro-Functional Molecules, 5th International Symposium of the Korean Society of Organic Synthesis, Busan, Korea, November 20-21, 2014.
38. S. Yamaguchi, Main Group Strategy for Photo- and Electro-Functional Molecules, Goethe-Universität Frankfurt, Frankfurt, Germany, November 25, 2014.
39. S. Yamaguchi, Excited State Design of Photo-functional Molecules, 18th IRTG Joint Symposium between University of Muenster and Nagoya University, Muenster, Germany, November 27-29, 2014.
- \*40. S. Yamaguchi, Main Group Strategy for Photo- and Electro-Functional Molecules, International Symposium on Electronic Properties in pi-Conjugated Materials III, Würzburg, Germany, March 11-13, 2015.
- \*41. S. Yamaguchi, "Some Fluorescent Molecules Containing Main Group Elements," The 2nd International AIE Symposium, May 15-18, 2015, Guangzhou, China
42. S. Yamaguchi, "New Fluorophore Skeletons for Bioimaging," The 3rd International Symposium on Transformative Bio-Molecules (ISTbM-3), Nagoya University, Japan May 25-26, 2015.
43. Shigehiro Yamaguchi, "Main Group Strategy for Photo- and Electronic Functions", The 14th International Symposium on Inorganic Ring Systems (IRIS-14), July 27-31, 2015, Regensburg, Germany
44. Shigehiro Yamaguchi, "Phosphorus-containing fluorophores for bioimaging", Organo-Main Group Avenues toward Advanced Materials (#16), The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), December 15, 2015, Honolulu, Hawaii, USA
45. Shigehiro Yamaguchi, "Chemistry of boron-doped nanographenes", Organo-Main Group Avenues toward Advanced Materials (#16), The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), December 15, 2015, Honolulu, Hawaii, USA
46. K. Usui, Y. Nishimoto, A. J. Page, H. A. Witek, S. Irle, 2012 Materials Research Society Spring Meeting, San Francisco, CA, U.S.A., April 9-13, 2012.
47. S. Irle, "Autocatalytic networks of chemical reaction processes in high-temperature materials science", May 10-12, 2012: "JST International Symposium on Multi-Scale

- Simulation of Condensed-Phase Reaction Systems”, Nagoya University, Japan, May 10-12, 2012.
48. S. Irle, “*Quantum Chemical MD Simulations of Graphene Formation*”, “International Symposium on Computational Sciences: Simulations for Material and Biological Systems”, Shanghai, China, August 12-15, 2012.
  49. S. Irle, “*Towards accurate approximate density functional theory potentials for beryllium-plasma interactions*”, 1st CRP meeting on “Data for Erosion and Tritium Retention in Be”, IAEA, Vienna, Austria, September 26-28, 2012.
  50. S. Irle, “*Origin of the Size-Dependent Fluorescence Blueshift in [n]Cycloparaphenylenes*”, 2012 International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCCP’12), Hong Kong Baptist University, Hong Kong, December 1-3, 2012.
  51. S. Irle, “*Origin of the Size-Dependent Fluorescence Blueshift in [n]Cycloparaphenylenes*”, “Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON) 2013”, Burapha University and Chemical Society of Thailand, Bangsaen Beach, Chon Buri, Thailand, January 23-25, 2013.
  52. S. Irle, “*SWCNT Growth from Chiral and Achiral Carbon Nanorings: Prediction of Chirality and Diameter Influence on Local Growth Rates*”, The Sixth NASA – Air Force Research Laboratory – Honda – Rice University Workshop on Nucleation and Growth Mechanisms of Single Wall Carbon Nanotubes, San Antonio, Texas, USA, April 12-16, 2013.
  53. S. Irle, “*Theoretical Studies of Photoluminescence Properties of Endohedral Metallofullerenes*” 223<sup>rd</sup> Electrochemical Society Meeting, Session H3, Toronto, Canada, May 12-16, 2013.
  54. S. Irle, “*Rh(I)-catalyzed Aldol-type Reaction of Organonitriles Under Mild Conditions: Theoretical Investigations*”, International Symposium on Homogeneous Chemical Reactivity, Ibaraki University, Mito, Japan June 14-15, 2013.
  55. M. A. Addicoat, Y. Nishimura, H. A. Witek, A. J. Page, S. Irle, “*Recent developments for the quantum chemical investigation of systems with high structural complexity*”, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 6), Gyeongju, Korea, July 10-13, 2013.
  56. S. Irle, “*Molecular Dynamics Simulations of Fullerene Formation Reveal Elements of Darwinian Natural Selection*”, Workshop “Synthesis and Spectroscopy of Large Carbon Molecules”, Institute for Theoretical Atomic, Molecular, and Optical Physics (ITAMP), Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge, MA, U.S.A, October 21-23, 2013.
  57. S. Irle, “*Changes in Molecular and Electronic Structure of POM Clusters in Batteries During Charging and Discharging*”, 16th IRTG Joint Symposium, Münster, Germany, November 11-12, 2013.
  58. S. Irle, “*Recent developments for the quantum chemical investigation of systems with high structural complexity*”, “International Symposium on Molecular Simulations in Biology, Chemistry, and Physics”, Nagoya University, Japan, Satellite meeting of the “3<sup>rd</sup> International Conference on Molecular Simulation” in Kobe, Japan November 16, 2013.
  59. S. Irle, “*Recent developments for the quantum chemical investigation of systems with high structural complexity*”, “The Third International Symposium on Computational Sciences: Advanced Methods, Software and HPC Architectures, and Their Applications in Computational Material and Biological Sciences”, Shanghai, China, November 18-20, 2013.
  60. S. Irle, “*Changes in Molecular and Electronic Structure of POM Clusters in Batteries During Charging and Discharging*”, “International Symposium on Atomic Cluster Catalysis”, Tsinghua University, Beijing, China November 21, 2013.
  61. S. Irle, “*Introduction to the density-functional tight-binding (DFTB) method*”, “International Symposium on Atomic Cluster Catalysis”, Tsinghua University, Beijing, China, November 21, 2013.

62. S. Irle, “*Origin of the Size-Dependent Fluorescence Blueshift in [n]Cycloparaphenylenes*”, 2013 International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCPC’13), Bangsaen Beach, Cholburi, Thailand, December 9-13, 2013.
63. S. Irle, “*TD-DFTB/MD Simulation of UV/Vis Fluorescence Spectra*”, International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCPC’13), Bangsaen Beach, Cholburi, Thailand, December 9-13, 2013.
64. S. Irle, “*Fun with graphenes: Quantum chemical simulations of synthesis and hydrogenation dynamics*”, International Workshop on Atomically Controlled Fabrication Technology, Nananoshima Center, Osaka, Japan, February 5-6, 2014.
65. S. Irle, “*Molecular Dynamics in Computational Materials Sciences: From the Study of Nanostructure Formation to the Design of Fluorescent Dye Molecules*”, Institute of Chemical Research International Symposium 2014 (ICRIS’14) “The Science and Technology of Smart Materials”, Kyoto University, Uji, Japan, March 10-12, 2014.
66. S. Irle, J. Wang, T. Kowalczyk, “*Unusual fluorescence from lanthanide-containing endohedral metallofullerenes and metal carbide fullerenes*”, XI GIRONA SEMINAR on Carbon, Metal, and Carbon-Metal Clusters: From Theory to Applications, Girona, Spain, June 30-July 3, 2014.
67. S. Irle, “*Brief review of quantum chemical calculations on H-Fe interactions*”, Meeting on “Plasma-Wall Interaction with Reduced Activation Steel Surfaces”, IAEA, Vienna, Austria, August 20-22, 2014.
68. S. Irle, “*Progress towards accurate quantum chemical molecular dynamics simulations of plasma interactions with beryllium surfaces*”, 2nd CRP meeting on “Data for Erosion and Tritium Retention in Be”, IAEA, Vienna, Austria, August 17-19, 2014.
69. S. Irle, “*Recent developments for the quantum chemical investigation of systems with high structural complexity*”, Satellite Meeting “Japan-Russia Joint Symposium - Chemical Theory for Complex Systems” of the International Conference “Molecular Complexity in Modern Chemistry [MCMC-2014], Moscow, Russia, September 13-19, 2014.
70. S. Irle, “*CPP fluorescence and seeded SWCNT growth mechanisms probed in quantum chemical simulations*”, Fusion Conference “From Carbon-Rich Molecules to Carbon-Based Materials”, El Jadida, Morocco, September 22-25, 2014.
- \*68. S. Irle, “*On the Importance of Dynamics in Molecular Systems: From the Study of Nanostructure Formation to the Design of Photoactive Molecules*”, Keynote lecture, International Symposium on “Optobiotechnology”, OptoBio Technology Research Center, Nagoya Institute of Technology, Nagoya, Japan, October 4, 2014.
69. S. Irle, H. Kitoh-Nishioka, T. Hayashi, D. Jiang, Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, “*Calculation of Charge Carrier Mobility in Covalent Organic Frameworks*”, XIXth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology (QSCP XIX), Taipei, Taiwan, November 11-17, 2014.
70. S. Irle, “*Fun with graphenes: Quantum chemical simulations of synthesis and hydrogenation dynamics*”, Satellite meeting of the 15<sup>th</sup> International Congress of Quantum Chemistry: “Advances in Modeling Nano Materials”, Hefei, China, June 14-17, 2015.
- \*71. S. Irle, “*Super-reduced POM<sup>27-</sup>: An Excellent Molecular Cluster Battery Component and Semipermeable Molecular Capacitor*”, Keynote lecture, The 19<sup>th</sup> International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE19), Ubon Ratchathani, Thailand, June 17-19, 2015.
72. S. Irle, “*Simulations of dynamic C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub> self-assembly cut the Gordian Knot: Coexistence of bottom-up and top-down mechanisms*”, Invited lecture, Molecular Designs for Advance Materials: Workshop and Conference, Chiang Mai University, Thailand, November 24-27, 2015.
73. S. Irle, “*A priori prediction of chemical reaction mechanisms in complex systems based on quantum chemical molecular dynamics*”, Pacificchem 2015, Honolulu, HI, U.S.A., December 15-20, 2015.
74. S. Irle, “*Calculation of Charge Carrier Mobility in Covalent Organic Frameworks*”, Pacificchem 2015, Honolulu, HI, U.S.A., December 15-20, 2015.

② 口頭発表 (国内会議 97 件、国際会議 24 件)

〈国内〉

1. 深澤愛子, 唐澤 隆, 岸 大将, 田中裕紀, 張 紅雨, 王 健, Stephan Irle, 山口茂弘(名大院理), 「ジチエニルアセチレンの分子内二重 5-exo 環化反応によるチオフエン縮環  $\pi$  電子系の開発」, 第 59 回高分子討論会, 北海道大学, 2010 年 9 月 15-17 日.
2. 荒木貴史, 森 憲二, 若宮淳志, 山口茂弘(名大院理), 「ジチエノ縮環 1,2-ジヒドロ-1,2-ジボリンの合成, 物性, 反応性」, 第 37 回有機典型元素化学討論会, 室蘭, 2010 年 11 月 25-27 日.
3. 荒木貴史, 山口茂弘(名大院理), 「テトラチエニルボロールの合成と物性」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
4. 周 治国, 櫛田知克(名大院理), 若宮淳志(京大化研), 山口茂弘(名大院理), 「平面固定型トリアリールボラン (1): 合成, 構造および物性」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
5. 櫛田知克, 首藤亜由美, 周治国, 若宮淳志, 山口茂弘(名大院理), 「平面固定型トリアリールボラン (2): 求核剤との反応」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
6. 飯田あずさ, 関岡杏奈, 山口茂弘(名大院理), 「複素環縮環ラダー型ボロールの合成と物性」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
7. 名倉和彦, 斉藤尚平, Stephan Irle, 山口茂弘(名大院理), 「チアゾリル基を含むテトラアリールチオフエンの光物性」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
8. 毛利和弘, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「チアゾール環状 4 量体の合成と物性」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
9. 岸 大将, 深澤愛子, 山口茂弘(名大院理), 「ビ(チエノ[2,3-c]チオフエン)誘導体の固体光物性」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
10. 丹下 聡, 深澤愛子, 山口茂弘(名大院理), 「ビ(チアゾール縮環ヘテロアリアル)の合成および物性」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
11. 中倉 健, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「2 本のアルキル鎖で連結したターチオフエン二量体の固体物性」, 日本化学会第 91 春季年会講演予稿集, 神奈川大学, 2011 年 3 月 11 日 (講演予稿集発行日).
12. 山口茂弘(名大院理), 「ボロール  $\pi$  電子系の合成と物性」, 日本学術振興会創造機能化学第 116 委員会 6 月期研究会, 東京, 2011 年 6 月 6 日.
13. 毛利和弘, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「チアゾール環状 4 量体の合成と動的挙動」, 第 22 回基礎有機化学討論会, つくば国際会議場, 2011 年 9 月 21-23 日.

14. 山口茂弘(名大院理),「ホウ素を鍵元素とする光・電子機能性有機材料の創製」,第2回統合物質シンポジウム「化学合成力と機能創出」,名古屋大学,平成23年11月7-8日.
15. 櫛田知克,周 治国(名大院理),若宮淳志(京大化研),山口茂弘(名大院理),平面固定トリアリールボランの反応性:ボラタアントラセンおよびボラシクロファン誘導体の合成と性質,第38回有機典型元素化学討論会,石川県立音楽堂,2011年12月7-9日.
16. 首藤亜由美,櫛田知克(名大院理),福島達也,梶 弘典(京大化研),山口茂弘(名大院理),「平面固定トリフェニルボラン部位で拡張したチオフェン $\pi$ 電子系の合成と物性」,日本化学会第93春季年会,2012年3月28日,慶應義塾大学.
17. 櫛田知克,周 治国(名大院理),片山哲郎,伊都将司,宮坂 博(阪大院基礎工),作田絵里,喜多村 昇(北大院理),Stephan Irle(名大院理),若宮淳志(京大化研),山口茂弘(名大院理),「平面固定トリフェニルボランの光物性」,日本化学会第93春季年会,2012年3月28日,慶應義塾大学.
18. 袁 春雪,斉藤尚平,山口茂弘(名大院理),「シクロオクタテトラエン骨格を介して縮環したナフタレンイミド二量体の合成と物性」,日本化学会第93春季年会,2012年3月28日,慶應義塾大学.
19. 大島寛也,深澤愛子,山口茂弘(名大院理),「ジ(2-チエニルアセチレン)環状二量体の合成,構造および反応性」,日本化学会第93春季年会,2012年3月28日,慶應義塾大学.
20. 中倉 健,斉藤尚平,山口茂弘(名大院理),「柔軟な2本のリンカーで架橋したオリゴチオフェン環状二量体の合成と固体物性」,日本化学会第93春季年会,2012年3月28日,慶應義塾大学.
21. 岸 大将,深澤愛子,山口茂弘(名大院理),「非対称型ビ(チエノチオフェン)誘導体の合成と固体光物性」,日本化学会第93春季年会,2012年3月28日,慶應義塾大学.
22. 林 賢三,山口茂弘(名大院理),「発光性液体としてのトリアルキルシリル置換ピレンの合成」,日本化学会第93春季年会,2012年3月27日,慶應義塾大学.
23. 名倉和彦,斉藤尚平(名大院理),Frank Glorius(ミュンスター大),山口茂弘(名大院理),「分子内に N-ヘテロサイクリックカルベンとボラン部位を含む $\pi$ 共役系の合成と物性」,日本化学会第93春季年会,3K4-32,2012年3月27日,慶應義塾大学.
24. 松尾恭平,斉藤尚平,山口茂弘(名大院理),「トリアリールボランの分子内ラジカル環化反応による含ホウ素縮合多環式 $\pi$ 共役系の合成と物性」,日本化学会第93春季年会,2012年3月25日,慶應義塾大学.
25. 斉藤尚平,Chuangdong Dou,松尾恭平,山口茂弘(名大院理),ホウ素ドーブされたナノグラフェンの化学,第23回基礎有機化学討論会,京都,2012年9月19-21日
26. 吉村柁彦,毛利和弘,斉藤尚平(名大院理),山口茂弘(名大WPI-ITbM・名大院理),「非平面かつ柔軟なシクロオクタテトラエンを基本骨格とするカラムナー液晶」日本化学会第93春季年会,立命館大学,2013年3月22-25日.
27. 櫛田知克(名大院理),山口茂弘(名大WPI-ITbM・名大院理),「ボラシクロファンの化学:ホウ素-ベンゼン $\sigma$ 錯体の形成」日本化学会第93春季年会,立命館大学,2013年3月22-25日.

28. 名倉和彦, 齊藤尚平(名大院理), 遊佐 齊(物材機構), 山脇 浩, 藤久裕司(産総研), 佐藤寛泰(リガク), 下池田勇一(JEOL RESONANCE), 山口茂弘(名大WPI-ITbM・名大院理), 「圧力下における $\pi$ 電子系の化学: 静水圧と機械的すり潰しの区別」日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
29. 大島寛也, 深澤愛子(名大院理), 山口茂弘(名大院理), 「チオフェン縮環ヘプタレンおよびジアニオンの合成と構造」日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
30. 首藤亜由美, 櫛田知克, 山口茂弘(名大院理), 「平面固定トリフェニルボランを基本骨格に用いた液晶材料の創製」日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
31. 白井秀典, 櫛田知克, 山口茂弘(名大院理), 「三配位ホウ素で共役を拡張した平面固定トリチルラジカルの合成と物性」日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
32. 山口恵理子, 深澤愛子(名大院理), Andreas Feldmann(ミュンスター大), 小坂洋平, 臼井孝介, 横川大輔, Irle Stephan(名大院理), Gerhard Erker(ミュンスター大), 山口茂弘(名大院理), 「3位で $\pi$ 拡張したホスホールオキシドの蛍光特性と励起状態ダイナミクス」日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
33. 毛利和弘, 齊藤尚平(名大院理), 山口茂弘(名大WPI-ITbM・名大院理), 「チアゾール4量体の熱的電子環状反応」, 日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
34. 大角真一朗, Chuandong Dou, 松尾恭平, 齊藤尚平(名大院理), 山口茂弘(名大WPI-ITbM・名大院理), 「長鎖アルコキシル置換ホウ素ドーブナノグラフェンの合成」日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
35. 安達 誠, 深澤愛子, 中倉 健, 齊藤尚平(名大院理), 山口茂弘(名大WPI-ITbM・名大院理), 「S-ペックマン色素: 高い電子受容性をもつ新奇な色素骨格の開発」, 日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
36. 山口茂弘(名大WPI-ITbM・名大院理), 「ソフト $\pi$ マテリアルの創製と機能発現」CREST「ナノ構造体」領域第3回公開シンポジウム, 東京, 2013年6月4日.
37. 齊藤尚平, 信末俊平, 毛利和弘, 藤原武徳, 佐伯昭紀, 関 修平, 藤久裕司, 山脇 浩, 山口茂弘, 柔軟な非平面積層型 $\pi$ 電子系の静水圧下における可逆な異方的収縮, 第24回基礎有機化学討論会, 学習院大学, 2013年9月5-7日
38. 櫛田知克, 山口茂弘, 平面固定トリフェニルボランの電子状態変化に伴う構造変化, 第40回有機典型元素化学討論会, 近畿大学, 2013年12月5-7日
39. 鈴木直弥, 名倉和彦, 深澤愛子, 鬼頭宏任, 横川大介, Stephan Irle, 齊藤尚平, 山口茂弘アルキルアミン鎖で架橋した 2,5-ジチエニルピロールのESIPT 発光特性, 日本化学会第94春季年会, 1A4-17, 名古屋大学, 2014年3月27日
40. E. Yamaguchi, A. Fukazawa, Y. Kosaka, Y. Sato, T. Sasaki, M. Ueda, N. Sasaki, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, Environment-Responsive Fluorescent Probe Containing a Phosphole Oxide, 日本化学会第94春季年会, 1A4-15, 名古屋大学, 2014年3月27日
41. 安達誠, 深澤愛子, 山口茂弘チオラクトンの環拡大反応による S-ペックマン色素の構造異性化, 日本化学会第94春季年会, 1A7-14, 名古屋大学, 2014年3月27日

42. 信末俊平, 齊藤尚平, 毛利和弘, 山口茂弘異方的に圧縮可能なチャンネル状空間の創出を目指した非平面 $\pi$ 共役分子の集積構造の構築, 日本化学会第94春季年会, 1A5-11, 名古屋大学, 2014年3月27日
43. 白井秀典, 櫛田知克, 山口茂弘ホウ素安定化平面固定トリチルラジカルの構造と発光特性, 日本化学会第94春季年会, 1A6-09, 名古屋大学, 2014年3月27日
44. 安藤直紀, 櫛田知克, 深澤愛子, 糸山修平, 塩田淑仁, 吉澤一成, 山口茂弘, トリアリールボランの光誘起環化反応: 一般性および反応機構の解明, 日本化学会第94春季年会, 1A1-06, 名古屋大学, 2014年3月27日
45. 浅井健吾, 深澤愛子, 山口茂弘 $\beta$ 位連結部位を有する環状オリゴチオフェンの合成と物性, 日本化学会第94春季年会, 2A7-31, 名古屋大学, 2014年3月28日
46. 大島寛也, 深澤愛子, 山口茂弘チオフェン縮環テトラキスデヒドロ[16]アスレンの渡環環化, 日本化学会第94春季年会, 2A7-41, 名古屋大学, 2014年3月28日
47. 森 千草, 齊藤尚平, Yuan Chuxue, Cristopher Camacho, Stephan Irle, 山口茂弘, 中央に8員環をもつ柔軟なアセン類縁体の環境依存性3色発光, 日本化学会第94春季年会, 4A7-07, 名古屋大学, 2014年3月30日
48. 大角真一朗, Chuandong Dou, 松尾恭平, 齊藤尚平, 山口茂弘, 中央に2つのホウ素を導入したハニカム状 $\pi$ 共役分子のルイス酸としての挙動, 日本化学会第94春季年会, 4A5-45, 名古屋大学, 2014年3月30日
49. 松尾恭平, 齊藤尚平, 山口茂弘三配位ホウ素を組み込んだ新規縮合多環式 $\pi$ 共役分子のルイス酸性と光物性, 日本化学会第94春季年会, 4A5-32, 名古屋大学, 2014年3月30日
50. 齊藤 尚平, 津坂 英里, 信末 俊平, 山口 茂弘,  $\pi$ スタッキングした柔軟な炭化水素骨格の光融解現象と光剥離接着剤への応用, 第25回基礎有機化学討論会, 東北大学, 2014年9月7-9日.
51. 齊藤 尚平, 袁 春雪, 森 千草, 津坂 英里, Christopher Camacho, Stephan Irle, 山口 茂弘, 単成分RGB発光をしめす柔軟な発光団の開発とその展開, 2014光化学討論会, 北海道大学, 2014年10月11-13日.
52. 松尾 恭平, 齊藤 尚平, 山口 茂弘, ホウ素-窒素配位結合を有するルイス酸塩基錯体の光解離, 第41回有機典型元素化学討論会, 宇部市文化会館, 2014年11月27-29日.
53. 櫛田 知克, 首藤 亜由美, 山口 茂弘, 平面固定トリフェニルボランを基本骨格とする液晶材料の光物性, 第41回有機典型元素化学討論会, 宇部市文化会館, 2014年11月27-29日.
54. 須田真司, 深澤愛子, 多喜正泰, 佐藤良勝, 東山哲也, 山口茂弘, 赤色発光を示すホスファフルオレセイン色素の開発と細胞イメージングへの応用, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
55. 大角真一朗, Chuandong Dou, 松尾恭平, 齊藤尚平, 山口茂弘, 中央に2つのホウ素をドーブしたナノグラフェンの還元特性, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
56. 齊藤尚平, 川井茂樹, 大角真一朗, Adam Foster, Meyer Ernst, 山口茂弘, ホウ素ドーブグラフェンナノリボン (B-GNR) の精密合成, 電子構造, ルイス酸性, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
57. 櫛田知克, 白井秀典, 岡本敏宏, 松井弘之, 山岸正和, 植村隆文, 竹谷純一, 山口茂弘, 含ホウ素中性ラジカルを用いた両極性 Mott トランジスタ, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.

58. 安達誠, 深澤愛子, 山口茂弘, 電子受容性ジケトチオピラノチオピラン骨格を用いた赤色発光材料の開発, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
59. 鈴木直弥, 深澤愛子, 多喜正泰, 鎌田賢司, 山口茂弘, ESIPT蛍光団を用いた二光子励起近赤外発光材料の開発, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
60. C. Wang, A. Fukazawa, E. Yamaguchi, M. Taki, Y. Sato, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, Highly Fluorescent and Photostable Phosphole-based Dyes, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
61. 森千草, 齊藤尚平, Chunxue Yuan, 山口茂弘, 動く発光添加剤を用いたエポキシ樹脂の硬化過程の可視化, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
62. 大島寛也, 深澤愛子, 山口茂弘, 縮合多環ペンタレンの迅速合成と反芳香族性, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
63. 小笠原宏亮, 大崎博司, 多喜正泰, 山口茂弘, ベンゾホスホールオキシド骨格を用いたレシオ型ナトリウム蛍光プローブの開発, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
64. 浅井健吾, 深澤愛子, 山口茂弘, トロピリウムイオンを電子受容性部位とするD-A-D型 $\pi$ 共役カチオンの合成と物性, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
65. 岩原秀明, 櫛田知克, 山口茂弘, 9-フェニルアントラセンにおける平面固定化の効果, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
66. 信末俊平, 齊藤尚平, 津坂英里, 原 光生, 山口茂弘, 柔軟なアントラセン二量体を骨格にもつ光剥離型接着材料の開発と界面における剥離現象の解析, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
67. 柏木章宏, 齊藤尚平, 山口茂弘, アセン伸長反応: 反応条件の最適化および基質適用範囲の検証, 日本化学会第95春季年会, 日本大学船橋キャンパス, 2015年3月26-29日.
68. 山口茂弘,  $\pi$ 電子系の機能追求のための分子デザイン, CREST 第5回公開シンポジウム「高機能ナノ構造体-分子の世界からマクロの世界へ-」, 2015年6月4日, 東京
69. 大島寛也, 深澤愛子, 山口茂弘, “反芳香族性ペンタレンを含む縮合多環 $\pi$ 電子系の合成と物性”, 第26回基礎有機化学討論会, 2015年9月24-26日, 愛媛大学・松山大学
70. 山口茂弘, “典型元素を用いた光・電子機能性 $\pi$ マテリアルの創製”, CREST プロセスインテグレーション合同第2回公開シンポジウム, 2015年9月29日, 品川
71. 深澤愛子, WANG Chenguang, 山口恵理子, 田邊誼之, 多喜正泰, 佐藤良勝, 東山哲也, 山口茂弘, ベンゾホスホール P-オキシドを鍵骨格とする高耐光性蛍光色素の開発と超解像蛍光イメージングへの応用, 第42回有機典型元素化学討論会, 2015年12月3-5日, 名古屋大学
72. 山口恵理子, WANG Chenguang, 伊藤優介, 佐藤良勝, 多喜正泰, 東山哲也, 山口茂弘, チオフェンジオキシド骨格を基盤とする脂肪染色蛍光プローブの開発, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
73. 浅井健吾, 深澤愛子, 山口茂弘, ジチエノシクロヘプタトリエンを鍵とする近赤外吸収色素の合成と安定中性ラジカルへの変換, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.

74. 松尾恭平, 齊藤, 尚平, 山口茂弘, トリアリールボランの励起状態におけるルイス酸性の制御, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
75. 大島寛也, 深澤愛子, 山口茂弘, トテトラベンゾヘプタレン: 縮環構造が芳香族性に及ぼす効果, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
76. 岩原秀明, 吉尾正史, 加藤隆史, 山口茂弘, 平面固定9-フェニルアントラセンを基本骨格に用いたディスコチック液晶の創製, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
77. 上野亮, 齊藤尚平, 原光生, 山口茂弘, 動く発光分子の基板界面における環境応答性の評価, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
78. 柏木章宏, 齊藤尚平, 山口茂弘, 動く発光団のPEG修飾とその粘度応答性の評価, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
79. 河内寛明, 深澤愛子, 山口茂弘, チオエステルで架橋した剛直なジチエニルエテンの合成と光物性, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
80. 中崎智大, 河内寛明, 多喜正泰, 深澤愛子, 山口茂弘, 環状チオエステル構造を含むポリメチン近赤外吸収色素の開発と光音響イメージングプローブとしての機能評価, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
81. 戸田雄佑, 深澤愛子, 関岡杏奈, 山口茂弘, チアシクロノネンで末端をキャップしたオリゴチオフェンの合成と固体構造, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
82. 難波誉昌, 深澤愛子, 浅井健吾, 多喜正泰, 山口茂弘, 近赤外蛍光特性と高い光褪色耐性をもつホスファローダミン チオフェン類似体の合成, 日本化学会第96春季年会, 同志社大学京田辺キャンパス, 2016年3月24-27日.
83. T. Kubota, H. Nishizawa, H. Nakai, Stephan Irle, "Theoretical study of carbon capture and storage (CCS) technology with DFTB-MD method", 35<sup>th</sup> Symposium on Solution Chemistry of Japan, Waseda University, Tokyo, Japan, November 12-14, 2012.
84. D. Yokogawa, Y. Nishimoto, S. Irle, "Theoretical Study of the Hydrolysis of Cellobiose to Glucose in Ionic Liquid", 3<sup>rd</sup> Japanese Symposium on Ionic Liquids, Naha, Japan, December 7-8, 2012.
85. Y. Nishimura, H. A. Witek, S. Irle, "First Principles-Based Estimate of the Critical SWCNT Length for Raman D and G Band Intensity Inversion", 44<sup>th</sup> Fullerene-Nanotubes-Graphene General Symposium, The University of Tokyo, Tokyo, Japan, March 11-13, 2013.
86. S. Irle, Y. Nishimura, A. S. Fedorov, H. A. Witek, "Kinetic Stability Governs Relative Fullerene Isomer Abundance", 44<sup>th</sup> Fullerene-Nanotubes-Graphene General Symposium, The University of Tokyo, Tokyo, Japan, March 11-13, 2013.
87. Y. Nishimoto, T. Fujimori, D. Yokogawa, S. Irle, "Theoretical Investigation of an Aldol-Type Reaction with Rh complex", The 93<sup>rd</sup> Annual Spring Meeting, Chemical Society of Japan, Ritsumeikan University, Shiga Prefecture, Japan, March 22-25, 2013.
88. K. Usui, D. Yokogawa, S. Irle, "Theoretical Study of Electron Transfer in a Liquid Medium", The 93<sup>rd</sup> Annual Spring Meeting, Chemical Society of Japan, Ritsumeikan University, Shiga Prefecture, Japan, March 22-25, 2013.
89. S. Irle, Y. Nishimura, A. S. Fedorov, H. A. Witek, "Kinetic Stability Governs Relative Fullerene Isomer Abundance", The 93<sup>rd</sup> Annual Spring Meeting, Chemical Society of Japan, Ritsumeikan University, Shiga Prefecture, Japan, March 22-25, 2013.

90. K. Usui, D. Yokogawa, S. Irle, “*Theoretical Study of Electron Transfer in Water*”, “2013 Workshop on 3DRISM/RISM: Present and Future”, Ritsumeikan University, Shiga Prefecture, Japan, March 26-28, 2013.
91. Arifin, D. Yokogawa, S. Irle, “*Quantum chemical study of glucose hydrolysis in acidic environment using RISM-SCF-SEDD*”, “2013 Workshop on 3DRISM/RISM: Present and Future”, Ritsumeikan University, Shiga Prefecture, Japan, March 26-28, 2013.
92. Arifin, D. Yokogawa, S. Irle, “*Theoretical Study of Glucose Hydrolysis Mechanisms using RISM-SCF-SEDD*”, Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science, Kyoto, Japan, September 24-27, 2013.
93. S. Irle, “*Quantum chemical MD simulations of chirality-controlled carbon nanotube growth and edge-controlled graphene nanoribbon synthesis*”, 2013 JSAP-MRS Joint Symposium “High-Performance Computing and Electronic Structure Calculations in Materials Research”, Kyoto, Japan, September 16-17, 2013.
94. K. Usui, D. Yokogawa, S. Irle, “*Theoretical study of the charge transfer process in the fluorescent probe using RISM-SCF-SEDD*”, 36<sup>th</sup> Symposium on Solution Chemistry of Japan, Hokkaido, Japan, October 8-11, 2013.
95. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Irle, “*Formation of Metal Atom Triangles Accompanies the Super-Reduction of Polyoxometalate (POM) Clusters*”, The 94<sup>th</sup> Annual Spring Meeting, Chemical Society of Japan, Nagoya University, Nagoya, Japan, March 22-25, 2014.
96. K. Usui, D. Yokogawa, S. Irle, “*Theoretical Studies of Two-Photon Absorption Properties of Molecules with a Stilbene Framework*”, The 17<sup>th</sup> Annual Meeting of Theoretical Chemistry, Nagoya University, Nagoya, Japan, May 22-24, 2014.
97. S. Irle, “*Simulations of dynamic C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub> self-assembly cut the Gordian Knot: Coexistence of bottom-up and top-down mechanisms*”, 47<sup>th</sup> Fullerene-Nanotubes-Graphene General Symposium, Nagoya University, Nagoya, Japan, September 3-5, 2014.

〈国際〉

1. S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Novel Fused  $\pi$ -Conjugated Materials with Unusual Properties*”, 10th Joint Symposium of the IRTG Muenster-Nagoya, Muenster University, Germany, November 30-December 1, 2010.
2. K. Nagura, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Novel Fluorescent Oligoarenes: Excited-State Structural Change and Mechanochromism*”, 10th Joint Symposium of the IRTG Muenster-Nagoya, Muenster University, Germany, November 30 - December 1, 2010.
3. A. Fukazawa, T. Karasawa, D. Kishi, Y. Tanaka, H. Zhang, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Intramolecular Double 5-exo Cyclization of 3,3'-Disubstituted Dithienylacetylenes: Synthesis and Properties of Two Thiophene-Fused  $\pi$ -Electron Systems with Contrasting Electronic Structures*”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010), Honolulu, Hawaii, USA, December 17, 2010.
4. K. Nagura, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Design and Synthesis of Novel Fluorescent Oligoarenes*”, The 2011 International Symposium on Molecular Systems –Global COE Symposium for Young Researchers–, Fukuoka, Japan, May 9-11, 2011.
5. S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Boron-Containing  $\pi$ -Conjugated Materials with Unique Structural Features*”, 11st IRTG Joint Symposium, University of Münster and Nagoya University, Münster, Germany, May 9-10, 2011.
6. T. Kushida, Z. Zhou, A. Wakamiya, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Reactivity of Planar-Constrained Triarylboranes: Synthesis and Properties of Borataanthracene and Bora-Cyclophanes*”, 12nd IRTG Joint Symposium, University of Münster and Nagoya University, Nagoya University, October 3-4, 2011.
7. S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Chemistry of  $\pi$ -Conjugated Planarized*

- Triarylboranes*”, 10th International Conference of Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), Kyoto, May 21, 2012
8. S. Saito, K. Matsuo, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), Polycyclic  $\pi$ -Electron System with Boron at its Center, The 13th International Symposium on Inorganic Ring Systems (IRIS-13), Victoria, Canada, July 29-August 2, 2012.
  9. A. Fukazawa, H. Oshima (Nagoya Univ.), Y. Shiota, S. Takahashi, K. Yoshizawa (Kyushu Univ.), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Thiophene-fused Bisdehydro[12]annulene: A Trick for [2+2] Cycloaddition of Acetylenes under Either Photochemical or Thermal Conditions*”, The 12th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-12), Kyoto, Japan November 12-16, 2012.
  10. K. Nagura, S. Saito (Nagoya Univ.), R. Fröhlich, F. Glorius (Univ. of Münster), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Synthesis and Properties of  $\pi$ -Conjugated Systems with N-Heterocyclic Carbene Borane Unit*”, 2nd Junior International Conference of Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (2nd JICCEOCA), University Malaya, Kuala Lumpur, Malaysia, December 8-11, 2012.
  11. S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Toward Excited State Design of Fluorescent Molecules*”, The 1st International Symposium of Transformative Bio-Molecules, Nagoya University, April 18-19, 2013.
  12. E. Yamaguchi, A. Fukazawa (Nagoya Univ.), A. Feldmann (Univ. of Münster), K. Usui, D. Yokogawa (Nagoya Univ.), G. Erker (Univ. of Münster), S. Irle, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Unusual Solvent Effect on Luminescent Properties of Benzophosphole Oxides: Control of the Excited State Dynamics*”, 15th Joint Symposium of the IRTG Muenster-Nagoya, Nagoya University, Nagoya, May 20 - 21, 2013.
  13. K. Asai, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, “*Chemistry of Nonplanar Cyclic Oligothiophene with 3,3'-Bithiophene Linkage*,” The 16th Joint Seminar: University of Münster-Nagoya University, November 11–12, 2013.
  14. S. Yamaguchi, “ *$\pi$ -conjugated systems with photochromic and dynamic functions*,” The 16th Joint Seminar: University of Münster-Nagoya University, November 11–12, 2013.
  15. S. Yamaguchi, “*Organoboron Materials with Intriguing Reactivity and Properties*,” The 3rd International Conference on the MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Kyushu University, January 10-11, 2014.
  16. H. Oshima, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, Dearomatization-Induced Transannular Cyclization of Thiophene-Fused Bisdehydro[12]annulene, 97th Canadian Chemistry Conference and Exhibition, Vancouver, June 1-5, 2014.
  17. S. Yamaguchi, Emissive Benzophosphole Materials, The 20th International Conference on Phosphorus Chemistry (ICPC 2014), Dublin, June 28 - July 2, 2014.
  18. S. Yamaguchi, Excited State Design of Fluorescent Molecules for Bioimaging, The 1st CSRS-ITbM Joint Workshop, Nagoya, January 7, 2015.
  19. S. Yamaguchi, “*New Fluorophore Skeletons for Bioimaging*,” 16th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-16), Madrid, Spain, July 5-10, 2015.
  20. **J. Jakowski**, S. Irle, B. G. Sumpter, K. Morokuma, “*Real time simulations of electron transfer and energy transfer in carbon materials*”, SETCA meeting, University of Georgia, Athens, GA, U.S.A., May 17-19, 2012.
  21. Y. Wang, A. J. Page, Y. Nishimoto, H.-J. Qian, K. Morokuma, **S. Irle**, “*Haecelkite and Graphene Formation on a Metal Surface: Evidence for a Phase Transformation at the Edge of Criticality*”, 2012 Materials Research Society Spring Meeting, San Francisco,

CA, U.S.A., April 9-13, 2012.

22. **S. Irle**, “*Quantum Chemistry of Complex Systems*”, The 1<sup>st</sup> International Symposium on Transformative Bio-Molecules 2013, Nagoya University, Nagoya, Japan, April 18-19, 2013.
23. **S. Irle**, C. Camacho, Th. Niehaus, “*Temperature effect of the fluorescence blueshift in [n]cycloparaphenylenes with increasing molecular size*”, 112<sup>th</sup> Bunsentagung (Annual German Conference on Physical Chemistry), Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe, Germany, May 9-11, 2013.
24. **S. Irle**, “*First Principles-Based Estimate of the Critical SWCNT Length for Raman D and G Band Intensity Inversion*”, Session H4, 223<sup>rd</sup> Electrochemical Society Meeting, Toronto, Canada, May 12-16, 2013.

③ ポスター発表 (国内会議 75 件、国際会議 90 件)

〈国内〉

1. 谷口拓弘, 山口茂弘(名大院理), 「1,2-ジヒドロ-1,2-アザボリンを含む  $\pi$  電子系化合物の合成と性質」, 第 21 回基礎有機化学討論会, 名古屋大学, 2010 年 9 月 9-11 日.
2. 深澤愛子, 唐澤 隆, 張 紅雨, 王 健, **Stephan Irle**, 山口茂弘(名大院理), 「分子内光二重環化反応によるチオフエン縮環ペンタフルバレン類の合成と物性」, 第 21 回基礎有機化学討論会, 名古屋大学, 2010 年 9 月 9-11 日.
3. 岸 大将, 深澤愛子, 田中裕紀, 張 紅雨, 山口茂弘(名大院理), 「ビ(チエノ[2,3-c]チオフエン)を含む  $\pi$  電子系化合物: 分子内二重環化反応による合成と物性」, 第 21 回基礎有機化学討論会, 名古屋大学, 2010 年 9 月 9-11 日.
4. 猫橋祐貴, 山田 洋, 深澤愛子, 山口茂弘(名大院理), 「ホスホニウム・ボラート架橋ジチエニルエテンを基本骨格とする  $\pi$  共役オリゴマーの合成および物性」, 第 21 回基礎有機化学討論会, 名古屋大学, 2010 年 9 月 9-11 日.
5. 山口恵理子, 深澤愛子, 伊藤絵美, 山田 洋, 王 健, **Stephan Irle**, 山口茂弘(名大院理), 「分子内二重環化反応によるホスホニウム・ボラート架橋スチルベンの合成: 反応性および物性に及ぼす置換基効果」, 第 57 回有機金属化学討論会, 中央大学, 2010 年 9 月 16-18 日.
6. 岸 大将, 田中裕紀, 張 紅雨, 深澤愛子, 山口茂弘(名大院理), 「2,2'-ビ(チエノ[2,3-c]チオフエン)を基本骨格とする  $\pi$  共役化合物の合成および物性」, 第 4 回有機  $\pi$  電子系シンポジウム, 須磨, 2010 年 11 月 19-20 日.
7. 深澤愛子, 山口恵理子, 伊藤絵美, 山田 洋, 王 健, **Stephan Irle**, 山口茂弘(名大院理), 「分子内二重環化反応による双性イオン型架橋スチルベンの合成: 反応性および物性に及ぼす置換基効果」, 第 4 回有機  $\pi$  電子系シンポジウム, 須磨, 2010 年 11 月 19-20 日.
8. 名倉和彦, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「テトラチアゾリルチオフエンのメカノクロミズム」, 名古屋大学グローバル COE プログラム 第 4 回物質科学フロンティアセミナー 一分子の集合が拓く科学の最前線: 高分子, 超分子のサイエンス, 名古屋大学, 2010 年 11 月 19-20 日.
9. 飯田あずさ, 山口茂弘(名大院理), 「チオフエン縮環ボロールの合成および物性」, 名古屋大学グローバル COE プログラム 第 4 回物質科学フロンティアセミナー 一分子の集合が拓く科学の最前線: 高分子, 超分子のサイエンス, 名古屋大学, 2010 年 11 月 19-20 日.
10. 猫橋裕貴, 山田 洋, 深澤愛子, 山口茂弘(名大院理), 「ホスホニウム・ボラート架橋ジチエニルエテンを用いたドナー・アクセプター交互型  $\pi$  共役オ

リゴマーの合成および物性」, 名古屋大学グローバル COE プログラム 第 4 回物質科学フロンティアセミナー —分子の集合が拓く科学の最前線：高分子, 超分子のサイエンス—, 名古屋大学, 2010 年 11 月 19-20 日.

11. 松尾恭平, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「デヒドロベンゾ[12]アヌレンからのトリベンゾフルバレン骨格の形成」, 日本化学会第 91 春季年会, 神奈川大学, 2011 年 3 月 29 日.
12. 暮石結加, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「ノルボルナジエンで架橋されたビチオフエン二量体の合成と物性」, 日本化学会第 91 春季年会, 神奈川大学, 2011 年 3 月 29 日.
13. 毛利和弘, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「チアゾール環状四量体の合成と物性 —動的積層 $\pi$ 電子系の構築を目指して—」 JST-CREST「プロセスインテグレーションに向けた高機能ナノ構造体の創出」研究領域第1回公開シンポジウム, 東京, 2011年6月15日.
14. 中倉 健, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「2本のアルキル鎖で連結したターチオフエン二量体の固体物性」, JST-CREST「プロセスインテグレーションに向けた高機能ナノ構造体の創出」研究領域第1回公開シンポジウム, 東京, 2011年6月15日.
15. 岸 大将, 深澤愛子, 山口茂弘(名大院理), 「ビ(チエノ[2,3-*c*]チオフエン)誘導体の固体光物性」, JST-CREST「プロセスインテグレーションに向けた高機能ナノ構造体の創出」研究領域第1回公開シンポジウム, 東京, 2011年6月15日.
16. 暮石結加, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「ノルボルナジエン骨格で架橋したビス(ベンゾチエノ)ベンゼン二量体の構造と物性」, 第22回基礎有機化学討論会, つくば国際会議場, 2011年9月21-23日.
17. 岸 大将, 深澤愛子, 山口茂弘(名大院理), 「6,6'-ジアリアルビ(チエノ[2,3-*c*]チオフエン)誘導体の固体光物性」, 第22回基礎有機化学討論会, つくば国際会議場, 2011年9月21-23日.
18. 中倉 健, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「2本のアルキル鎖で連結したターチオフエン環状二量体の構造と固体物性」, 第22回基礎有機化学討論会, つくば国際会議場, 2011年9月21-23日.
19. 首藤亜由美, 櫛田知克, 周 治国(名大院理), 若宮淳志(京大化研), 山口茂弘(名大院理), 「平面固定トリアリアルポラン部位を有する $\pi$ 電子系の合成と物性」, 第2回統合物質シンポジウム「化学合成力と機能創出」, 名古屋大学, 平成23年11月7-8日.
20. 暮石結加, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「ノルボルナジエン骨格で架橋した縮環 $\pi$ 電子系の合成と構造」, 第2回統合物質シンポジウム「化学合成力と機能創出」, 名古屋大学, 平成23年11月7-8日.
21. 峯村和光, 深澤愛子, 山本恭平, 山口茂弘(名大院理), 「チオフエン縮環ペンタフルバレンの*E-Z*異性化と固体物性」, 日本化学会第93春季年会, 慶應義塾大学, 2012年3月26日.
22. 津坂英里, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「シクロオクタテトラエン骨格で縮環したジチエノベンゼン 2 量体の合成と構造」, 日本化学会第93春季年会, 慶應義塾大学, 2012年3月26日.
23. 毛利和弘, 斉藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「シクロオクタテトラエン骨格をもつチアゾール環状 4 量体の構造修飾」, 第 23 回基礎有機化学討論会, 京都, 2012 年 9 月 19-21 日

24. 津坂英里, Chuxue Yuan, 齊藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「シクロオクタテトラエン骨格を鍵とする柔軟かつ剛直な $\pi$ 電子系の創製」, 第23回基礎有機化学討論会, 京都, 2012年9月19-21日.
25. 大島寛也, 深澤愛子(名大院理), 塩田淑仁, 高橋翔也, 吉澤一成(九大先導研), 山口茂弘(名大院理), 「チオフエン縮環ビスデヒドロ[12]アヌレン: 近接したアセチレン部位をもつ $12\pi$ 電子系の分子内付加環化」, 第23回基礎有機化学討論会, 京都, 2012年9月19-21日.
26. 松尾恭平, 齊藤尚平, 山口茂弘(名大院理), 「ホウ素を中心に組み込んだ縮合多環式 $\pi$ 共役系の構造と物性」, 第23回基礎有機化学討論会, 京都, 2012年9月19-21日.
27. 深澤愛子, 岸 大将(名大院理), 関 修平(阪大院工), 山口茂弘(名大院理), 「ビ(チエノチオフエン) $\pi$ 電子系の分子配向制御と固体物性」, 第23回基礎有機化学討論会, 京都, 2012年9月19-21日.
28. 白井秀典, 櫛田知克(名大院理), 山口茂弘(名大 WPI-ITbM・名大院理), 「ホウ素 $\pi$ 共役骨格で拡張した平面固定トリチルラジカルの合成と物性」, 第6回有機 $\pi$ 電子系シンポジウム, 松山, 2012年12月14-15日.
29. 峯村和光, 唐澤 隆, 山本恭平, 深澤愛子(名大院理), 山口茂弘(名大 WPI-ITbM・名大院理), 「ジチエノペンタフルバレン骨格を含む大環状化合物の合成研究」, 第6回有機 $\pi$ 電子系シンポジウム, 松山, 2012年12月14-15日.
30. 大崎博司, 深澤愛子(名大院理), 山口茂弘(名大 WPI-ITbM・名大院理), 「水素結合部位を有するベンゾホスホールオキシドの発光特性」, 第6回有機 $\pi$ 電子系シンポジウム, 松山, 2012年12月14-15日.
31. 大崎博司, 深澤愛子(名大院理), 山口茂弘(名大 WPI-ITbM・名大院理), 「分子内水素結合を有するベンゾホスホールオキシドの発光特性」, 日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
32. 早川 敦, 深澤愛子, 岸 大将(名大院理), 山口茂弘(名大 WPI-ITbM・名大院理), 「ビ(チアゾロ[2,3-c]チオフエン)を基本骨格とする十字形 $\pi$ 共役系の開発」, 日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
33. 吉川利樹, 齊藤尚平(名大院理), 山口茂弘(名大 WPI-ITbM・名大院理), 「ノルボルナジエン縮環ポルフィリノイドの合成」, 日本化学会第93春季年会, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
34. 大島寛也, 深澤愛子, 山口茂弘, 脱芳香族化により誘起されるチオフエン縮環ビスデヒドロ[12]アヌレンの渡環環化, 第24回基礎有機化学討論会, 学習院大学, 2013年9月5-7日, ポスター賞受賞.
35. 津坂英里, 袁 春雪, 齊藤尚平, 山口茂弘, 柔軟な $\pi$ 共役骨格を基盤とした液晶化合物の光誘起相転移, 第24回基礎有機化学討論会, 学習院大学, 2013年9月5-7日.
36. 大角真一郎, 齊藤尚平, Chuandong Dou, 松尾恭平, 久米啓太, 吉川浩史, 阿波賀邦夫, 山口茂弘, ホウ素ドーブナノグラフェンの化学還元とリチウムイオン電池電極としての評価, 第24回基礎有機化学討論会, 学習院大学, 2013年9月5-7日.
37. 松尾恭平, 齊藤尚平, 山口茂弘, ホウ素を含む新規平面 $\pi$ 共役分子の合成とカラムナー構造の形成, 第24回基礎有機化学討論会, 学習院大学, 2013年9月5-7日.

38. 安藤直紀, 榎田知克, 深澤愛子, 塩田淑仁, 吉澤一成, 山口茂弘, トリアールボランの光ペリ環状反応, 2013年光化学討論会, 愛媛大学, 2013年9月11-13日.
39. 鈴木直弥, 名倉和彦, 深澤愛子, 鬼頭宏任, 横川大輔, Stephan Irle, 山口茂弘, 柔軟なジアルキルアミン鎖で架橋した2,5-ジチエニルピロールの二重発光特性, 2013年光化学討論会, 愛媛大学, 2013年9月11-13日, 優秀学生発表賞受賞.
40. 鈴木直弥, 深澤愛子, 名倉和彦, 鬼頭宏任, Stephan Irle, 齊藤尚平, 山口茂弘, アルキルアミン鎖で分子内架橋した2,5-ジチエニルピロールの二重発光特性, 第4回統合物質シンポジウム「ダイナミックに機能する統合物質の創製」, 北海道大学, 2013年10月31日-11月1日.
41. 安達 誠, 深澤愛子, 中倉 健, 齊藤尚平, 山口茂弘, S-ペックマン色素: 高い電子受容性をもつ新奇色素の合成および物性, 第4回統合物質シンポジウム「ダイナミックに機能する統合物質の創製」, 北海道大学, 2013年10月31日-11月1日.
42. 榎田知克, 山口茂弘, メチレン架橋トリフェニルボランのラジカルアニオン, 第4回統合物質シンポジウム「ダイナミックに機能する統合物質の創製」, 北海道大学, 2013年10月31日-11月1日.
43. 安藤直紀, 榎田知克, 深澤愛子, 塩田淑仁, 吉澤一成, 山口茂弘, ジメシチルボリル置換ヘテロアレーンの光誘起連続ペリ環状反応, 第40回有機典型元素化学討論会, 近畿大学, 2013年12月5-7日. ポスター賞受賞.
44. 信末俊平, 齊藤尚平, 毛利和弘, 山口茂弘, 圧縮可能なチャンネル状空間を指向した柔軟な非平面 $\pi$ 共役分子の集積構造の構築, 第7回有機 $\pi$ 電子系シンポジウム, 高崎ビューホテル, 2013年12月13-14日.
45. 鈴木直弥, 深澤愛子, 名倉和彦, 鬼頭宏任, 横川大輔, Stephan Irle, 齊藤尚平, 山口茂弘, アルキルアミン架橋 2,5-ジチエニルピロールのESIPT発光特性に対する置換基効果, 第25回基礎有機化学討論会, 東北大学, 2014年9月7-9日.
46. 上野 亮, 齊藤尚平, 山口茂弘, 発光性アントラセンイミドによる磁性ナノビーズの表面修飾, 第25回基礎有機化学討論会, 東北大学, 2014年9月7-9日.
47. 大崎 博司, Chih-Ming Chou, 齊藤尚平, 深澤愛子, 多喜 正泰, 山口茂弘, 柔軟な鎖で架橋された 9,10-ビス(2-チエニルエチニル)アントラセン環状二量体の蛍光特性, 第25回基礎有機化学討論会, 東北大学, 2014年9月7-9日. ポスター賞受賞.
48. 松尾 恭平, 齊藤尚平, 山口茂弘, ホウ素を含む多環式 $\pi$ 共役化合物の両極性電荷輸送特性, 第25回基礎有機化学討論会, 東北大学, 2014年9月7-9日. ポスター賞受賞.
49. 森 千草, 齊藤尚平, Chunxue Yuan, 山口茂弘, 柔軟な骨格の有機発光体を活用した接着剤硬化過程の可視化, 第63回高分子討論会, 長崎大学, 2014年9月24-26日. ポスター賞受賞.
50. 安藤直紀, 榎田知克, 山口茂弘, 立体的に混み合ったアミノボランの発光特性, 第41回有機典型元素化学討論会, 宇部市文化会館, 2014年11月27-29日. ポスター賞受賞.
51. 森 千草, 齊藤尚平, Chunxue Yuan, 山口茂弘, 動く $\pi$ 共役発光団を用いた接着剤硬化過程のリアルタイム可視化, 第5回物質統合シンポジウム「物質創成研究の新しい展望」, 名古屋大学, 2014年12月19-20日.

52. 安藤 直紀, 榎田 知克, 山口 茂弘, 立体的に込み合ったアミノボランの光物性, 第5回物質統合シンポジウム「物質創成研究の新しい展望」, 名古屋大学, 2014年12月19-20日.
53. 大島寛也, 深澤愛子, 山口茂弘, 反芳香族ペンタレンを含む拡張 $\pi$ 電子系の開発, CREST 第5回公開シンポジウム「高機能ナノ構造体-分子の世界からマクロの世界へ-」, 2015年6月4日, 東京.
54. 田邊誼之, 深澤愛子, Chenguang Wang, 山口茂弘, 優れた耐光性を有する高発光性ビス(ホスホリル)架橋スチルベンの構造-光物性相関, 第26回基礎有機化学討論会, 2015年9月24-26日, 愛媛大学・松山大学
55. 戸田雄佑, 関岡杏奈, 深澤愛子, 山口茂弘, チアシクロノネン縮環チエニル基でキャップした $\pi$ 電子系, 第26回基礎有機化学討論会, 2015年9月24-26日, 愛媛大学・松山大学
56. 早乙女広樹, 謝 永発, 榎田知克, 山口茂弘, ホウ素で安定化した平面固定トリチルラジカルの安定性と光物性, 第26回基礎有機化学討論会, 2015年9月24-26日, 愛媛大学・松山大学
57. 中崎智大, 河内寛明, 多喜正泰, 深澤愛子, 伏谷瑞穂, 松田晃孝, 菱川明栄, 山口茂弘, チオラクトン骨格を基盤とするポリメチン系近赤外吸収色素の開発および光音響イメージングプローブへの応用, 第26回基礎有機化学討論会, 2015年9月24-26日, 愛媛大学・松山大学
58. 信末俊平, 齊藤尚平, 山口茂弘, 齊藤祐太, 藪 浩, 張力に応答する発光性エラストマーフィルムの応答性に関する定量的な評価, 第26回基礎有機化学討論会, 2015年9月24-26日, 愛媛大学・松山大学
59. 須田真司, 深澤愛子, 山口恵理子, Marek Grzybowski, 多喜正泰, 佐藤良勝, 東山哲也, 山口茂弘, 赤色発光を示すホスファフルオレセイン色素の開発と蛍光イメージングへの応用, 第42回有機典型元素化学討論会, 2015年12月3-5日, 名古屋大学
60. 安藤直紀, 榎田知克, 山口茂弘, 平面固定B-フェニルジベンゾボレピンの合成と基礎物性, 第42回有機典型元素化学討論会, 2015年12月3-5日, 名古屋大学
61. Y. Nishimoto, H. Yoshikawa, S. Irle, K. Morokuma, "Molecular and Electronic Structure of the Super Reduced State of a Polyoxometalate (POM) Cluster,  $[Mo_{12}O_{40}P]^{-27}$ ", 3<sup>rd</sup> Symposium for Integrated Research on Chemical Synthesis, Kyushu University, Nishijin, Japan, June 25-30, 2012.
62. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Irle, "Formation of Mo Triangles Accompanies the Super-Reduction of Polyoxometalate (POM)", CSJ Chemistry Festa 2012, Tokyo Institute of Technology, Okayama, Japan, October 14-17, 2012.
63. T. Kaiho, M. Okoshi, H. Nishizawa, H. Nakai, Stephan Irle, "Theoretical Study by the DC-DFTB Method on Electrochemical Properties of Lithium-ion Devices", 35<sup>th</sup> Symposium on Solution Chemistry of Japan, Waseda University, Tokyo, Japan, November 12-14, 2012.
64. K. Usui, D. Yokogawa, S. Irle, "Theoretical study of excited states valid for large systems", 35<sup>th</sup> Symposium on Solution Chemistry of Japan, Waseda University, Tokyo, Japan, November 12-14, 2012.
65. Y. Nishimura, D. Yokogawa, S. Irle, "Theoretical Study on Hydrolysis Reaction of Cellobiose to Glucose in Ionic Liquids", 35<sup>th</sup> Symposium on Solution Chemistry of Japan, Waseda University, Tokyo, Japan, November 12-14, 2012.
66. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Irle, "Formation of Mo Triangles Accompanies the Super-Reduction of Polyoxometalate (POM)", 2<sup>nd</sup>

- Winterschool in Quantum Chemistry, Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan, December 17-18, 2012.
67. S. Irle, M. A. Addicoat, S. Fukuoka, “*CrazyLego: Building ionic liquid clusters block by block*”, 3<sup>rd</sup> Japanese Symposium on Ionic Liquids, Naha, Japan, December 7-8, 2012.
  68. T. Hayashi, D. Jiang, S. Irle, “*Quantum Chemical Investigation of Covalent Organic Frameworks*”, September 21-24, 2014: The 8th Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science, Hiroshima University, Hiroshima, Japan, September 21-24, 2014.
  69. K. Usui, Y. Matsui, E. Ohta, H. Ikeda, S. Irle, “*Theoretical study for triplet-triplet fluorescence of the trimethylenemethane biradical*”, The 8th Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science, Hiroshima University, Hiroshima, Japan, September 21-24, 2014.
  70. Arifin, D. Yokogawa, S. Irle, “*Quantum Chemical Study of Glucose Conversion to 5-Hydroxymethylfurfural using RISM-SCF-SEDD*”, 36<sup>th</sup> Symposium on Solution Chemistry of Japan, Hokkaido, Japan, October 8-11, 2013.
  71. Y. Nishimoto, R. Ushimaru, T. Fujimori, D. Yokogawa, H. Naka, S. Saito, S. Irle, “*Theoretical and Experimental Mechanistic Studies of a Rh(I)-Catalyzed Aldol-type Reaction of Organonitriles Under Mild Conditions*”, Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science, Kyoto, Japan, November 24-27, 2013.
  72. Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, S. Irle, “*Density-Functional Tight-Binding Combined with the Fragment Molecular Orbital Method*”, December 19-20, 2014: The 5<sup>th</sup> IGER Symposium, Nagoya University, Nagoya, Japan, December 19-20, 2014.
  73. A. Kumar, M. Nambo, Y. Ito, M. Yar, T. Ohkawa, J. D. Canseco Gonzalez, C. M. Crudden, T. Yoshimura, S. Irle, “*Field Point Model For Designing Selective Thyroid Hormone Receptor- $\beta$ -Selective Agonists By Using 3D-QSAR And Molecular Dynamics Simulations*”, The CSRS-ITbM Workshop 2015, Nagoya University, Nagoya, Japan, January 7, 2015.
  74. H. Kitoh-Nishioka, R. Yamada, K. Takahashi, S. Hagihara, D. Yokogawa, S. Irle, “*Collaborative Research on Development of Novel Genetically Encoding Fluorescent Label: Theoretical Studies on Auxin-binding Protein and FRET between GFPs*”, The CSRS-ITbM Workshop 2015, Nagoya University, Nagoya, Japan, January 7, 2015.
  75. D. Yokogawa, R. Tarsang, S. Irle, “*Theoretical studies for the design of bioimaging molecules*”, The CSRS-ITbM Workshop 2015, Nagoya University, Nagoya, Japan, January 7, 2015.

〈国際〉

1. E. Yamaguchi, A. Fukazawa, E. Ito, H. Yamada, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Substituent Effects on the Intramolecular Double Cyclization of Phosphanyl, Boryl-Substituted Diphenylacetylenes*”, The 9th Joint Seminar University of Münster-Nagoya University, Nagoya University, May 25, 2010.
2. D. Kishi, Y. Tanaka, H. Zhang, A. Fukazawa, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Synthesis and Properties of 2,2'-Bi(thieno[2,3-c]thiophene)-Containing  $\pi$ -Electron Systems*”, The 9th Joint Seminar University of Münster-Nagoya University, Nagoya University, May 25, 2010.
3. K. Nagura, C.-H. Zhao, S. Irle, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Emissive Nonplanar Oligoarenes with Boryl Groups at Lateral Positions*”, Annual Symposium of Nagoya University Global COE Program, Nagoya University, June 16, 2010.
4. T. Taniguchi, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*1,2-Dihydro-1,2-Azaborine-Containing  $\pi$ -Electron Systems*”, Annual Symposium of Nagoya University Global COE Program, Nagoya University, June 16, 2010.
5. A. Fukazawa, T. Karasawa, H. Zhang, J. Wang, S. Irle, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Thiophene-Fused Pentafulvalene Synthesized by an Intramolecular Photochemical Double Cyclization*”, The 5th International Conference on

- Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (ICCEOCA-5), Ambassador Hotel, Hsinchu, Taiwan, November 7-11, 2010.
6. A. Iida, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Borole-Containing Ladder  $\pi$ -Conjugated Compound*”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010), Honolulu, Hawaii, USA, December 17, 2010.
  7. T. Taniguchi, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Synthesis and Properties of 3,6-Diaryl-Substituted 1,2-Dihydro-1,2-azaborine*”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010), Honolulu, Hawaii, USA, December 17, 2010.
  8. E. Yamaguchi, A. Fukazawa, E. Ito, H. Yamada, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Substituent Effects on the Intramolecular Double Cyclization of Phosphanyl, Boryl-Substituted Diphenylacetylenes*”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010), Honolulu, Hawaii, USA, December 17, 2010.
  9. Y. Nekohashi, A. Fukazawa, H. Yamada, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Phosphonium- and Borate-Bridged Dithienylethene Oligomers*”, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010), Honolulu, Hawaii, USA, December 17, 2010.
  10. K. Nagura, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Mechanochromism of Tetrathiazolythiophene*”, The 1st International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis “Advanced Chemical Methodology for Creating Materials”, Sapporo, January 24-25, 2011.
  11. K. Mouri, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Cyclic Thiazole Tetramers: Synthesis, Structures, and Properties*”, The 1st International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis “Advanced Chemical Methodology for Creating Materials”, Sapporo, January 24-25, 2011.
  12. A. Shuto, T. Kushida, Z. Zhou (Nagoya Univ.), A. Wakamiya (Kyoto Univ.), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Synthesis and Properties of a  $\pi$ -Conjugated Compound Bearing Planar-Constrained Triarylborane Moieties*”, Annual Symposium of Nagoya University Global COE Program, Nagoya University, June 15, 2011.
  13. Y. Kureishi, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Dithienobenzene Dimer with Bicyclic-Bridge*”, Annual Symposium of Nagoya University Global COE Program, Nagoya University, June 15, 2011.
  14. K. Matsuo, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Tribenzofulvalene Synthesis by Intramolecular Electrophilic Cyclization of Dehydrobenzo[12]annulene*”, Annual Symposium of Nagoya University Global COE Program, Nagoya University, June 15, 2011.
  15. K. Nagura, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Stimuli-Triggered Fluorescence Change of Tetrathiazolythiophene*”, Annual Symposium of Nagoya University Global COE Program, Nagoya University, June 15, 2011.
  16. S. Saito, K. Nakakura, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Solid-State Properties of Terthiophene Dimers Linked by Two Alkyl Chains*”, 14th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-14), Eugene, Oregon, July 24-29, 2011.
  17. K. Mouri, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Cyclic Thiazole Tetramers: Synthesis, Structure, and Properties*”, 14th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-14), Eugene, Oregon, July 24-29, 2011.
  18. T. Kushida, Z. Zhou (Nagoya Univ.), A. Wakamiya (Kyoto Univ.), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Reaction of Planar-Constrained Triarylborane with Base: Synthesis of Planar-Constrained Borataanthracene*”, The XIVth International Conference on Boron Chemistry (IME Boron XIV), Niagara Falls, Canada, September 11-15, 2011.

19. K. Hayashi, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Silyl-Substituted Pyrenes as Emissive Liquids*”, Nagoya University Global COE International Symposium & 7th and 8th Yoshimasa Hirata Memorial Lectures, Nagoya University, November 28-30, 2011.
20. A. Iida, A. Sekioka, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Synthesis and Properties of Heteroarene-Fused Boroles*”, Nagoya University Global COE International Symposium & 7th and 8th Yoshimasa Hirata Memorial Lectures, Nagoya University, November 28-30, 2011.
21. K. Nakakura, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Macrocyclic Restriction with Flexible Alkylene Linkers: A Simple Strategy to Control the Solid-State Properties of  $\pi$ -Conjugated System*”, Nagoya University Global COE International Symposium & 7th and 8th Yoshimasa Hirata Memorial Lectures, Nagoya University, November 28-30, 2011.
22. T. Kushida, A. Shuto (Nagoya Univ.), T. Katayama, S. Ito, H. Miyasaka (Osaka Univ.), C. C. Leandro, S. Irle, Z. Zhou (Nagoya Univ.), A. Wakamiya (Kyoto Univ.), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Excited State Dynamics of Planarized Triphenylboranes*”, 10th International Conference of Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), Kyoto, Japan, May 22, 2012.
23. A. Shuto, T. Kushida (Nagoya Univ.), T. Fukushima, H. Kaji (Kyoto Univ.), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Synthesis and Properties of Thiophene  $\pi$ -Electron Systems Bearing Planarized Triphenylboranes*”, 10th International Conference of Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), Kyoto, Japan, May 21, 2012.
24. T. Kushida, A. Shuto (Nagoya Univ.), T. Katayama, S. Ito, H. Miyasaka (Osaka Univ.), E. Sakuda, N. Kitamura (Hokkaido Univ.), C. C. Leandro, S. Irle, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Planarized Triphenylboranes: Unique Structural Change in the Excited State*”, The 13th International Symposium on Inorganic Ring Systems (IRIS-13), Victoria, Canada, July 29-August 2, 2012.
25. K. Nagura, S. Saito (Nagoya Univ.), R. Fröhlich, F. Glorius (Univ. of Münster), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*N-Heterocyclic Carbene Borane-Containing  $\pi$ -Conjugated Systems*”, The 13th International Symposium on Inorganic Ring Systems (IRIS-13), Victoria, Canada, July 29-August 2, 2012.
26. K. Nagura, S. Saito (Nagoya Univ.), R. Fröhlich, F. Glorius (Univ. of Münster), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “ *$\pi$ -Conjugated Systems Containing N-Heterocyclic Carbene Borane Unit*”, The 14th Joint Seminar University of Münster-Nagoya University, Nagoya University, Japan, October 1-2, 2012.
27. T. Kushida, C. C. Leandro, S. Irle, A. Shuto (Nagoya Univ.), T. Katayama, S. Ito, H. Miyasaka (Osaka Univ.), E. Sakuda, N. Kitamura (Hokkaido Univ.), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Dual Emission of Planarized Triphenylboranes: Unique Structural Change in the Excited State*”, The 14th Joint Seminar University of Münster-Nagoya University, Nagoya University, Japan, October 1-2, 2012.
28. E. Yamaguchi, A. Fukazawa, Y. Kosaka, Y. Ichihashi, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Benzophosphole Oxides with Electron-donating Groups: Enhanced Emission in Polar Solvents*”, The 14th Joint Seminar University of Münster-Nagoya University, Nagoya University, Japan, October 1-2, 2012.
29. C. Yuan, S. Saito, C. C. Leandro, S. Irle, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Three-Color Emission from Flexible Anthraceneimide Dimers*”, The 12th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-12), Kyoto, Japan, November 12-16, 2012.
30. C. Dou, S. Saito, K. Matsuo, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Boron-Doped Nanographene as a Stable Closed-Shell Molecule*”, The 12th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-12), Kyoto, Japan, November 12-16, 2012.

31. K. Minemura, A. Fukazawa, T. Karasawa, K. Yamamoto, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Synthesis and Isomerization of Thiophene-fused Pentafulvalene*”, The 12th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-12), Kyoto, November 12-16, 2012.
32. S. Saito, C. Dou, K. Matsuo, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Bottom-up Organic Synthesis of Boron-Doped Nanographenes*”, The Seventh International Forum on Chemistry of Functional Organic Chemicals (IFOC-7), Tokyo University, Japan, November 18-19, 2012.
33. K. Minemura, A. Fukazawa, T. Karasawa, K. Yamamoto, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Synthesis and Reactivities of Thiophene-fused Pentafulvalenes*”, The 2nd International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Nagoya University, Japan, December 10-11, 2012.
34. C. Dou, K. Matsuo, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Development of Boron-Doped Nanographenes*”, The 2nd International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Nagoya University, Japan, December 10-11, 2012.
35. M. Adachi, A. Fukazawa, K. Nakakura, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*S-Pechmann Dye: A Thiolactone-Containing Organic Dye with Electron-Accepting Character and Its Solid-State Photophysical Properties*”, Nagoya Symposium 2013, Nagoya University, May 23, 2013.
36. H. Oshima, A. Fukazawa (Nagoya Univ.), Y. Shiota, S. Takahashi, K. Yoshizawa (Kyushu Univ.), S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Thiophene-fused Bisdehydro[12]annulene that Undergoes [2+2]-Type Alkyne Cycloaddition Either by Photoirradiation or Heating*”, Nagoya Symposium 2013, Nagoya University, May 23, 2013.
37. S. Osumi, S. Saito, C. Dou, K. Matsuo, K. Kume, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Boron-Doped Nanographenes as Electrode Materials for the Li-Ion Battery*”, Nagoya Symposium 2013, Nagoya University, May 23, 2013.
38. H. Oshima, A. Fukazawa, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Transannular Cyclization of Thiophene-Fused Bisdehydro[12]annulene*”, The 15th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-15), Taipei, Taiwan, Jul 28-Aug 2, 2013.
39. C.-M. Chou, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Bending Crystals of Macrocyclic pi-Skeleton with Flexible Alkylene Linkers*”, The 15th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-15), Taipei, Taiwan, Jul 28-Aug 2, 2013.
40. M. Adachi, A. Fukazawa, K. Nakakura, S. Saito, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*S-Pechmann Dye: A Thiolactone-Containing Organic Dye with an Electron-Accepting Character*”, The 15th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-15), Taipei, Taiwan, Jul 28-Aug 2, 2013.
41. S. Osumi, S. Saito, C. Dou, K. Matsuo, K. Kume, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Yamaguchi (Nagoya Univ.), “*Boron-Doped Nanographenes as Electrode Materials for the Li-Ion Battery*”, The 15th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-15), Taipei, Taiwan, Jul 28-Aug 2, 2013.
42. A. Fukazawa, E. Yamaguchi, Y. Kosaka, Y. Ichihashi, S. Yamaguchi, Integrated Synthesis of Functionalized Benzophospholes and Their Luminescent Properties, The 8th International Symposium on Integrated Synthesis, Nara, November 29-December 1, 2013.
43. H. Oshima, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, Transannular Cyclization of the Thiophene-Fused Bisdehydro[12]annulene, IGER International Symposium on Chemical Science in Asia Facilitating Singapore-Japan Scientific Interchange, Nagoya University, May 26-28, 2014.

44. N. Suzuki, A. Fukazawa, K. Nagura, S. Saito, H. Kitoh-Nishioka, D. Yokogawa, S. Irlle, S. Yamaguchi, A Strap Strategy for the Construction of Excited-State Intramolecular Proton Transfer (ESIPT) System with Dual Fluorescence, IGER International Symposium on Chemical Science in Asia Facilitating Singapore-Japan Scientific Interchange, Nagoya University, May 26-28, 2014.
45. H. Osaki, C.-M. Chou, S. Saito, A. Fukazawa, M. Taki, S. Yamaguchi, Macrocyclic Anthracene Dimer with Efficient Excimer Emission, The 17th Joint Symposium of Core-to-Core/IRTG Programs on Elements Function for Transformative Catalysis and Materials, Nagoya University, June 12-13, 2014.
46. E. Yamaguchi, A. Fukazawa, Y. Kosaka, Y. Sato, T. Sasaki, M. Ueda, N. Sasaki, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, A Benzophosphole Oxide with Electron-Donating Group: Synthesis and Application as an Environment-Responsive Fluorophore, The 20th International Conference on Phosphorus Chemistry (ICPC 2014), Dublin, June 28 - July 2, 2014.
47. N. Ando, T. Kushida, A. Fukazawa, S. Itoyama, Y. Shiota, K. Yoshizawa, S. Yamaguchi, Photoreaction of Dimesitylborylarenes, The XXVI International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC2014), Sapporo, July 13-18, 2014.
48. S. Saito, C. Mori, E. Tsuzaka, C. Yuan, S. Yamaguchi, Viscosity sensing hydrocarbon / Light-melt carbon adhesive, The International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic  $\pi$ -Molecules and Materials (CURO- $\pi$ ), Uji, Kyoto, Japan, October 19-21, 2014.
49. H. Osaki, C.-M. Chou, S. Saito, A. Fukazawa, M. Taki, S. Yamaguchi, Fluorescence Properties of 9,10-bis(2-thienylethynyl)anthracene Macrocyclic Dimer Linked with Flexible Tethers, IRTG Nagoya-Munster Abschluss-symposium, Munster, Germany, November 28, 2014. ポスター賞受賞
50. K. Matsuo, S. Saito, S. Yamaguchi, Boron-Embedded Polycyclic  $\pi$ -Conjugated Systems as Solution Processable Organic Semiconductor, 16th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-16), Madrid, Spain, July 5-10, 2015.
51. H. Oshima, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, Polycyclic Pentalenes: Facile Synthesis and Enhanced Aromaticity, 16th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-16), Madrid, Spain, July 5-10, 2015. ポスター賞受賞
52. K. Asai, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, Tropylium-Containing  $\pi$ -Conjugated Cations, 16th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-16), Madrid, Spain, July 5-10, 2015.
53. Hiroya Oshima, Aiko Fukazawa, Shigehiro Yamaguchi, Synthesis and Properties of Polycyclic  $\pi$ -Electron Systems Containing an Hückel Antiaromatic Pentalene, The 8th International Forum on Chemistry of Functional Organic Chemicals (IFOC-8), November 15-16, The University of Tokyo
54. Hiroaki Ogasawara, Masayasu Taki, Hiroshi Osaki, Aiko Fukazawa, Yoshikatsu Sato, Tetsuya Higashiyama, Shigehiro Yamaguchi, Benzophosphole Oxide-based Ratiometric Probe for Intracellular Sodium Ions, The 8th International Forum on Chemistry of Functional Organic Chemicals (IFOC-8), November 15-16, The University of Tokyo
55. Saki Azeyanagi, Kenzou Hayashi, Masayasu Taki, Yoshikatsu Sato, Tetsuya Higashiyama, Shigehiro Yamaguchi, Organic fluorescent nanoparticles encapsulating a liquid pyrene, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), December 18, 2015, Honolulu, Hawaii, USA
56. Naoya Suzuki, Aiko Fukazawa, Masayasu Taki, Kenji Kamada, Shigehiro Yamaguchi, Two-photon excited NIR emissive dye with ESIPT behavior, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), December 18, 2015, Honolulu, Hawaii, USA

57. Hiroshi Osaki, Chih-Ming Chou, Masayasu Taki, Shohei Saito, Aiko Fukazawa, Yoshikatsu Sato, Tetsuya Higashiyama, Shigehiro Yamaguchi, Long-lived and bright excimer emission of 9,10-bis(thienylethynyl)anthracene macrocyclic dimer, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), December 18, 2015, Honolulu, Hawaii, USA
58. Hiroaki Ogasawara, Masayasu Taki, Hiroshi Osaki, Yoshikatsu Sato, Kimi Ogasawara, Tetsuya Higashiyama, Shigehiro Yamaguchi, Red-emitting ratiometric fluorescent probe for Na<sup>+</sup> based on a benzophosphole P-oxide scaffold, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015), December 19, 2015, Honolulu, Hawaii, USA
59. C. Camacho, S. Irle, *“Temperature effect in the fluorescence blueshift of [n]cycloparaphenylenes with increasing molecular size”*, 14th International Congress of Quantum Chemistry, Boulder, CO, U.S.A., June 25-30, 2012.
60. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Irle, *“Molecular and Electronic Structure of the Super Reduced State of a Polyoxometalate (POM) Cluster, [Mo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>P]<sup>-27</sup>”*, 14th International Congress of Quantum Chemistry, Boulder, CO, U.S.A., June 25-30, 2012.
61. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Irle, *“Formation of Mo Triangles Accompanies the Super-Reduction of Polyoxometalate (POM)”*, 14<sup>th</sup> joint seminar of IRTG program, Nagoya University, Nagoya, Japan, October 1-2, 2012.
62. C. Camacho, S. Irle, *“Temperature effect in the fluorescence blueshift of [n]cycloparaphenylenes with increasing molecular size”*, 2nd International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Nagoya University, Nagoya, Japan, December 10-11, 2012.
63. K. Usui, D. Yokogawa, S. Irle, *“Theoretical study of excited states including solvent effect”*, 2nd International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Nagoya University, Nagoya, Japan, December 10-11, 2012.
64. Y. Nishimura, D. Yokogawa, S. Irle, *“Theoretical Study on Hydrolysis Reaction of Cellobiose to Glucose in Ionic Liquids”*, 2nd International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Nagoya University, Nagoya, Japan, December 10-11, 2012.
65. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Irle, *“Formation of Mo Triangles Accompanies the Super-Reduction of Polyoxometalate (POM)”*, 2nd International Conference on MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Nagoya University, Nagoya, Japan, December 10-11, 2012.
66. Arifin, D. Yokogawa, S. Irle, *“Glucose Hydrolysis in Acid Condition: A Quantum and Statistical Study”*, 15th Joint Symposium between University of Münster and Nagoya University, Nagoya, Japan, May 20-21, 2013
67. Y. Nishimura, H. A. Witek, S. Irle, *“First Principles-Based Estimate of the Critical SWCNT Length for Vanishing Raman D Band Intensity”*, June 16-20, 2013: 5<sup>th</sup> Workshop on Nanotube Optics and Nanospectroscopy, Santa Fe, NM, U.S.A., June 16-20, 2013.
68. Arifin, D. Yokogawa, S. Irle, *“Quantum Chemical Study of Glucose Hydrolysis in Acid Environment Using RISM-SCF-SEDD”*, 33<sup>rd</sup> International Conference on Solution Chemistry, Kyoto, Japan, July 7-12, 2013.
69. K. Usui, D. Yokogawa, S. Irle, *“Theoretical investigation of the electron transfer process in water”*, 33<sup>rd</sup> International Conference on Solution Chemistry, Kyoto, Japan, July 7-12, 2013.
70. T. Kowalczyk, Y. Nishimura, S. Irle, *“Simulating the final steps of fullerene synthesis”*, The Sixth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC 6), Gyeongju, Korea, July 10-13, 2013.
71. M. A. Addicoat, S. Fukuoka, A. J. Page, S. Irle, *“Stochastic Structure Determination for Conformationally Flexible Clusters: CrazyLego”*, The 8<sup>th</sup> Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP), Budapest, Hungary, August 25-31, 2013.

72. Y. Nishimoto, R. Ushimaru, T. Fujimori, D. Yokogawa, H. Naka, S. Saito, S. Irle, “*Theoretical and Experimental Investigations of an Aldol-type Reaction with Rh Complex*”, The 8<sup>th</sup> Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP), Budapest, Hungary, August 25-31, 2013.
73. Arifin, D. Yokogawa, S. Irle, “*Theoretical Study of Glucose Transformation to 5-Hydroxymethylfurfural using RISM-SCF-SEDD*”, The 8<sup>th</sup> Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP), Budapest, Hungary, August 25-31, 2013.
74. K. Usui, S. Irle, D. Yokogawa, “*Theoretical investigation of the electron transfer process in water*”, The 8<sup>th</sup> Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP), Budapest, Hungary, August 25-31, 2013.
75. Arifin, D. Yokogawa, S. Irle, “*Quantum Chemical Study of Glucose Conversion to 5-Hydroxymethylfurfural using RISM-SCF-SEDD*”, 2013 International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCPC’13), Bangsaen Beach, Choburi, Thailand, December 9-13, 2013.
76. A. Kumar, M. Yar, M. Nambo, J. D. C. Gonzalez, C. M. Crudden, Y. Ito, T. Ohkawa, T. Yoshimura, S. Irle, “*Ligand Field Based Library Design For Novel Thyroid Hormone Receptor- $\beta$  Selective Agonists*”, 2013 International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCPC’13), Bangsaen Beach, Choburi, Thailand, December 9-13, 2013.
77. H. Kitoh-Nishioka, D. Yokogawa, S. Irle: “*Quantum Chemical Study on FRET between Fluorescent Proteins*”, 2013 International Workshop on Frontiers of Theoretical and Computational Physics and Chemistry (WFTCPC’13), Bangsaen Beach, Choburi, Thailand, December 9-13, 2013.
78. Arifin, D. Yokogawa, S. Irle, “*Quantum Chemical Study of Glucose Conversion into 5-Hydroxymethylfurfural in Aqueous Acid Environment*”, The 3<sup>rd</sup> International Conference on the MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Fukuoka, Japan, January 10-11, 2014.
79. H. Kitoh-Nishioka, D. Yokogawa, S. Irle, “*Quantum Chemical Study on FRET between Fluorescent Proteins*”, The 3<sup>rd</sup> International Conference on the MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Fukuoka, Japan, January 10-11, 2014.
80. T. Kowalczyk, Y. Nishimura, S. Irle, “*Simulating the final steps of fullerene synthesis*”, The 3<sup>rd</sup> International Conference on the MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Fukuoka, Japan, January 10-11, 2014.
81. H. Kitoh-Nishioka, D. Yokogawa, S. Irle, “*Quantum Chemical Study on FRET between Fluorescent Proteins*”, The 2<sup>nd</sup> International Symposium on “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions”, Kyoto University, Kyoto, Japan, January 11-12, 2014.
82. A. S. Hutama, C. A. J. Fisher, C. Hettich, B. Aradi, Th. Frauenheim, S. Irle, “*Density-Functional Tight-Binding Automated Parameterization of Zr-Zr and Zr-O Repulsive Potentials*”, The 4<sup>th</sup> International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC4), ACT City Hamamatsu Congress Center, Hamamatsu, Japan, May 8-10, 2014.
83. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Irle, “*Super-reduced POM<sup>27-</sup>: An Excellent Molecular Cluster Battery Component and Semipermeable Molecular Capacitor*”, The 4<sup>th</sup> International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC4), ACT City Hamamatsu Congress Center, Hamamatsu, Japan, May 8-10, 2014.
84. A. Hutama, C. A. J. Fisher, C. Hettich, B. Aradi, Th. Frauenheim, S. Irle, “*Density-Functional Tight-Binding Automated Parameterization of Zr-Zr and Zr-O Repulsive Potentials*”, 17<sup>th</sup> joint seminar of IRTG program, Nagoya University, Nagoya, Japan, June 12-13, 2014.
85. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Kondo, J. Yamaguchi, K. Itami, S. Irle, “*Theoretical investigation toward the enantioselectivity of a Pd catalyzed reaction*”, 17<sup>th</sup> joint seminar of IRTG program, Nagoya University, Nagoya, Japan, June 12-13, 2014.

86. Y. Nishimoto, D. Yokogawa, H. Kondo, J. Yamaguchi, K. Itami, S. Irle, "Theoretical investigation toward the enantioselectivity of a Pd catalyzed reaction", The 4<sup>th</sup> International Conference on the MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis & ICOMC 2014 Pre-symposium in Kyoto, Kyoto University, Uji, Japan, July 10-11, 2014.
87. H. Kitoh-Nishioka, D. Yokogawa, S. Irle, "Theoretical Study on FRET between Fluorescent Proteins", The 4<sup>th</sup> International Conference on the MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis & ICOMC 2014 Pre-symposium in Kyoto, Kyoto University, Uji, Japan, July 10-11, 2014.
88. V. S. Reddy, C. Camacho, J. Xia, R. Jasti, S. Irle, "Vibronic Coupling Effects on the Photophysics of Cycloparaphenylenes", CURO- $\pi$  International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic  $\pi$ -Molecules and Materials, Kyoto University, Uji, Japan, October 19-21, 2014.
89. A. J. Page, H.-B. Li, S. Irle, K. Morokuma, "SWCNT Growth from Organic Precursors Without a Catalyst: Possibilities and Limitations Revealed by Theoretical Simulations", CURO- $\pi$  International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic  $\pi$ -Molecules and Materials, Kyoto University, Uji, Japan, October 19-21, 2014.
90. Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, S. Irle, "Density-Functional Tight-Binding Combined with the Fragment Molecular Orbital Method", The 5<sup>th</sup> International Conference on the MEXT Project of Integrated Research on Chemical Synthesis, Nagoya University, Nagoya, Japan, December 19-20, 2014.

(4)知財出願

- ①国内出願 (5件)

(5)受賞・報道等

- ①受賞

・山口グループ

- 中倉 健, 齊藤尚平, 山口茂弘, 第 22 回基礎有機化学討論会 ポスター賞, つくば国際会議場, 2011 年 9 月 23 日.
- 暮石結加, 齊藤尚平, 山口茂弘, 第 22 回基礎有機化学討論会 ポスター賞, つくば国際会議場, 2011 年 9 月 23 日.
- 櫛田知克, 周 治国, 若宮淳志, 山口茂弘, 第 38 回有機典型元素化学討論会 優秀講演賞, 石川県立音楽堂, 2011 年 12 月 9 日.
- T. Kushida, A. Shuto, T. Katayama, S. Ito, H. Miyasaka, C. C. Leandro, S. Irle, Z. Zhou, A. Wakamiya, S. Yamaguchi, Poster Award, 10th International Conference of Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), Kyoto, Japan, May 22, 2012.
- A. Shuto, T. Kushida, T. Fukushima, H. Kaji, S. Yamaguchi, IUPAC Poster Prize, 10th International Conference of Heteroatom Chemistry (ICHAC-10), Kyoto, Japan, May 21, 2012.
- 松尾恭平, 齊藤尚平, 山口茂弘, 第 23 回基礎有機化学討論会 ポスター賞, 京都, 2012 年 9 月 19-21 日.
- S. Saito, C. Dou, K. Matsuo, S. Yamaguchi, Best Poster Award, The Seventh International Forum on Chemistry of Functional Organic Chemicals (IFOC-7), Tokyo University, Japan, November 18-19, 2012.
- 白井秀典, 櫛田知克, 山口茂弘, 第 6 回有機  $\pi$  電子系シンポジウム ポスター賞, 松山, 2012 年 12 月 14-15 日.

- 山口茂弘, 第9回日本学術振興会賞, 2013年2月4日.
- 深澤愛子, 日本化学会若い世代の特別講演証, 2013年3月27日.
- 櫛田知克, 山口茂弘, 日本化学会第93春季年会 学生講演賞, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
- 名倉和彦, 齊藤尚平, 遊佐 斉, 山脇 浩, 藤久裕司, 佐藤寛泰, 下池田勇一, 山口茂弘, 日本化学会第93春季年会 学生講演賞, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
- 毛利和弘, 齊藤尚平, 山口茂弘, 日本化学会第93春季年会 学生講演賞, 立命館大学, 2013年3月22-25日.
- S. Osumi, S. Saito, C. Dou, K. Matsuo, K. Kume, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Yamaguchi, *SYNFACTS* Poster Prize, Nagoya Symposium 2013, Nagoya University, May 23, 2013.
- H. Oshima, A. Fukazawa, S. Yamaguchi, IUPAC Best Poster Award, The 15th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-15), Taipei, Taiwan, Jul 28-Aug 2, 2013.
- C.-M. Chou, S. Saito, S. Yamaguchi, ISNA-15 Best Poster Award, The 15th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-15), Taipei, Taiwan, Jul 28-Aug 2, 2013.
- S. Osumi, S. Saito, C. Dou, K. Matsuo, K. Kume, H. Yoshikawa, K. Awaga, S. Yamaguchi, ISNA-15 Best Poster Award, The 15th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-15), Taipei, Taiwan, Jul 28-Aug 2, 2013.
- 松尾恭平, 日本化学会第94春季年会学生講演賞, 2014年3月
- 松尾恭平, 基礎有機化学討論会ポスター賞, 2014年9月
- 大崎博司, 基礎有機化学討論会ポスター賞, 2014年9月
- 森 千草, 高分子化学討論会ポスター賞, 2014年9月
- 大崎博司, IRTG シンポジウムポスター賞, 2014年11月
- 松尾恭平, 有機典型元素化学討論会ポスター賞, 2014年11月
- 安藤直紀, 有機典型元素化学討論会ポスター賞, 2014年11月
- 大島寛也, IGER 年次成果報告会ポスター賞, 2014年12月
- 松尾恭平, IGER 年次成果報告会講演賞, 2015年1月
- 浅井健吾, 深澤愛子, 山口茂弘, 日本化学会第95春季年会 学生講演賞, 日本大学, 2015年3月26-29日
- Hiroya Oshima, Aiko Fukazawa, Shigehiro Yamaguchi, 16th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-16), Poster Award, July 5-10, 2015.
- 山口茂弘, 日本学術振興会賞, 2013年2月
- 山口茂弘, 向山賞, 2014年9月

• Irle グループ

- 横川大輔, 平成24年度溶液化学研究会奨励賞, 早稲田大学, 2012年11月13日.
- 臼井孝介, ポスター賞, 2012年 CSJ フェスタ, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2012年10月14日.

## ②マスコミ(新聞・TV等)報道

- 平面固定ホウ素 (原著論文, 山口グループ 文献5) に関する報道
  - プレス発表 (科学技術振興機構, 名古屋大学, 京都大学), 「炭素材料にホウ素を組み込む新手法に成功-革新的な有機エレクトロニクス材料の開発に向けて躍進-」, 平成 24 年 2 月 28 日. [概要] 有機エレクトロニクス材料の革新的な素材の開発法として, ホウ素を炭素骨格に組み込み「完全な平面構造に固定する」という新手法の開発に世界で初めて成功した.
  - 日刊工業, 「炭素材料にホウ素固定化, 電子輸送性有機材高性能化に道」, 平成 24 年 2 月 28 日.
  - 日経産業新聞, 「平らな導電有機材, 合成」, 平成 24 年 2 月 29 日.
  - 
  - 化学工業日報, 「炭素材料にホウ素導入」, 平成 24 年 3 月 1 日.
  - マイナビニュース, 「名大など, ホウ素を炭素骨格に組み込む有機エレクトロニクス技術を開発」, 平成 24 年 3 月 1 日
- 中日新聞, “研究室発” 欄「常識破る新材料生む魅力」, 平成 24 年 4 月 17 日 日刊

## ③その他

- *Angew. Chem. Int. Ed.* 誌 Hot Paper に選出: 論文 4 S. Saito, K. Nakakura, S. Yamaguchi, “Macrocyclic Restriction with Flexible Alkylene Linkers: A Simple Strategy to Control the Solid-State Properties of  $\pi$ -Conjugated Systems”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, 714-717 (2012).
- 英国王立化学会 RSC Publishing の Chemical Science Blog に掲載: 論文 7 A. Iida, A. Sekioka, S. Yamaguchi, “Heteroarene-Fused Boroles: What Governs the Antiaromaticity and Lewis Acidity of the Borole Skeleton?,” *Chem. Sci., Chem. Sci.*, **3**, 1461-1466 (2012).
- *Chem. Asian J.* 誌の Inside Cover および VIP (Very Important Paper) に選出: 論文 9 T. Araki, A. Wakamiya, K. Mori, S. Yamaguchi, “Elucidation of  $\pi$ -Conjugation Modes in Diarene-Fused 1,2-Dihydro-1,2-diboron Dianions”, *Chem. Asian J.*, **7**, 1594-1603 (2012).
- *SYNFACTS* 誌 (Thieme) にハイライトされた: 論文 11 K. Mouri, S. Saito, S. Yamaguchi, “Highly Flexible  $\pi$ -Extended Cyclooctatetraenes: Cyclic Thiazole Tetramers with Head-to-Tail Connection”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, 5971-5975 (2012).
- 論文 20 A. Fukazawa, H. Oshima, Y. Shiota, S. Takahashi, K. Yoshizawa, S. Yamaguchi, “Thiophene-Fused Bisdehydro[12]annulene that Undergoes Transannular Alkyne Cycloaddition Either by Light or Heat”, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 1731-1734 (2013).
- 論文 21 A. Iida, S. Saito, T. Sasamori, S. Yamaguchi, “Borylated Dibenzoborepin Synthesized via Skeletal Rearrangement and its Photochromism Based on Bora-Nazarov Cyclization”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, 3760-3764 (2013).
- 米国化学会 JACS Spotlights および *SYNFACTS* 誌 (Thieme 社) の SYNFACTS of the month に掲載: 論文 12 S. Saito, K. Matsuo, S. Yamaguchi, “Polycyclic  $\pi$ -Electron System with Boron at Its Center”, *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 9130-9133 (2012).

- 英国王立化学会 *Chem. Commun.* 誌の表紙 (Cover Picture) に選出: 論文 14 T. Kushida, Z. Zhou, A. Wakamiya, S. Yamaguchi, “Planarized B-Phenylborataanthracene Anion: Structural and Electronic Impacts of Coplanar-Constraint”, *Chem. Commun.*, **48**, 10715-10717 (2012).
- 英国王立化学会 *Chem. Commun.* 誌の裏表紙 (Back Cover) に選出: 論文 22 A. Fukazawa, M. Adachi, K. Nakakura, S. Saito, and S. Yamaguchi, “S-Pechmann Dye: A Thiolactone-Containing Organic Dye with Pronounced Electron-Accepting Character and Its Solid-State Photophysical Properties”, *Chem. Commun.*, **49**, 7117-7119 (2013).
- 米国化学会 *Chemical & Engineering News* に掲載: 論文 24 C. Yuan, S. Saito, C. Camacho, S. Irle, I. Hisaki, S. Yamaguchi, “A  $\pi$ -Conjugated System with Flexibility and Rigidity that Shows Environment-Dependent RGB Luminescence”, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 8842-8845 (2013).

(6) 成果展開事例

① 実用化に向けての展開

② 社会還元的な展開活動

該当なし.

## § 5 研究期間中の活動

### 5. 1 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2013年5月29日	Theory of Electronic Excitations in Large Molecules	名古屋大学野依記念物質科学研究館講演室	25名	励起状態の量子化学シミュレーション解析に関する方法論を主題に議論した。
2013年5月22日	CREST-Nagoya Workshop 2013 “Advanced $\pi$ -Electron Materials: Elaborated Design toward New Function”	名古屋大学野依記念物質科学研究館講演室	100名	Swagger 教授(米国), 竹内正之 GL (NIMS), 久保孝史教授(阪大)を招待講演者として招聘し, $\pi$ 電子系の分子設計, 合成, 物性研究の最前線について議論した。

## § 6 最後に

次世代の有機エレクトロニクス技術の発展の礎となりうる優れた  $\pi$  共役骨格の創出とその凝集構造の制御により, 特異な物性や機能の発現を目指した本研究の成果を一枚のスライドにまとめると下図のようになる。基本となる重要ないくつかの分子設計指針の提案をもとに, 数々の秀逸な  $\pi$  電子系分子の創出, 固体構造制御, 機能の発現を達成することができ, 研究の目標から見た達成度も十分に高いと評価できる。その中でも特に重要で, かつ今後も引き続き発展させたい2つのテーマが, 1) ホウ素ドーブナノグラフェンの化学と2) 超耐光性発光性骨格を基軸とした蛍光色素ライブラリーの創製である。両者は, 典型元素化学や構造有機化学, 有機合成化学, 物理有機化学などの化学の枠に留まらず, マテリアルサイエンス, バイオロジー全体から見ても極めて重要な研究課題である。これら2つの重要な研究の柱を得られた点でも本プロジェクトは極めて有意義であったと自己評価できる。

