

# マテリアル先端リサーチインフラ利用報告書

## ARIM User's Report

[Release : 2026.02.26] [Update : 2026.02.26]

### 課題データ / Project Data

課題番号 Project Issue Number	23UT0058
利用課題名 Title	新規有機半導体分子の設計と構造解析
利用した実施機関 Support Institute	東京大学 / Tokyo Univ.
機関外・機関内の利用 External or Internal Use	内部利用 (ARIM事業参画者以外) / Internal Use (by non ARIM members)
ARIM半導体基盤PF 関連課題 Related to ARIM-SETI	指定なし / No Designation
横断技術領域 Cross-Technology Area	計測・分析/Advanced Characterization
重要技術領域 Important Technology Area	革新的なエネルギー変換を可能とするマテリアル/Materials enabling innovative energy conversion 高度なデバイス機能の発現を可能とするマテリアル/Materials allowing high-level device functions to be performed
キーワード Keywords	有機EL, 有機半導体, クリスタルエンジニアリング, 太陽電池 / Solar cell, 光デバイス / Optical Device, X線回折 / X-ray diffraction

### 利用者と利用形態 / User and Support Type

利用者名 (課題申請者) User Name (Project Applicant)	福間 翔太
所属名 Affiliation	東京大学 大学院理学系研究科
共同利用者氏名 Names of Collaborators Excluding Supporters in the Hub and Spoke Institutes	
ARIM実施機関支援担当者 Names of Supporters in the Hub and Spoke Institutes	
利用形態 Support Type	機器利用/Equipment Utilization

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

利用した主な設備 Equipment ID & Name	UT-201 : 無機微小結晶構造解析装置
---------------------------------	-----------------------

## 報告書データ / Report

概要 (目的・用途・実施内容) Abstract (Aim, Use Applications and Contents)	スピロ共役を有する有機半導体分子の構造, 合成設計, 超分子機能の解明を目的とした単結晶X線解析を行った。
実験 Experimental	高輝度単結晶X線解析装置VariMaxDualを用い, 新規有機半導体分子及びその複合体, ラジカル体の結晶構造を取得した。
結果と考察 Results and Discussion	単結晶X線回折を用い, 二重スピロ構造を持つ新規分子複数種類の構造解析に成功し, それらは以下に示すような興味深い現象を示唆していた。1. 分子内の3枚の $\pi$ 平面が直交する形で剛直に固定化されている2. 溶媒分子と多点相互作用による複合体を作成し, 高い溶解度を実現する3. ラジカルカチオンの状態で単離できる程度に安定性が高いこれらの結果は本研究で開発した新規分子の有機エレクトロニクスにおける有用性を示している。
図・表・数式 Figures, Tables and Equations	
その他・特記事項 (参考文献・謝辞等) Remarks (References and Acknowledgements)	

## 成果発表・成果利用 / Publication and Patents

DOI (論文・プロシーディング) [1] DOI (Publication and Proceedings)	Shota Fukuma, Binary molecular design for oriented crystalline film and solution-processed interdigitated hole injection layer in quantum dot LED devices, , , (2024). <a href="https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-gpww8">DOI: 10.26434/chemrxiv-2024-gpww8</a>
DOI (論文・プロシーディング) [2] DOI (Publication and Proceedings)	Yan Zhang, Iron-Catalyzed Aza-Annulative $\pi$ -Extension with Alkynes via C-H Activation using an Oxidative Auxiliary, , , (2024). <a href="https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-xtwlj">DOI: 10.26434/chemrxiv-2024-xtwlj</a>
DOI (論文・プロシーディング) [3] DOI (Publication and Proceedings)	Shota Fukuma, Deep-red Emitting Copper(I) Indenediyltrisphosphine Complexes with Minimized Skeletal Vibrations and Configurational Disorder, <i>Angewandte Chemie International Edition</i> , <b>64</b> , (2024). <a href="https://doi.org/10.1002/anie.202416583">DOI: 10.1002/anie.202416583</a>
DOI (論文・プロシーディング) [4] DOI (Publication and Proceedings)	Takumi Sakamaki, Doubly Spiro-Conjugated Chiral Carbocycles Exhibiting SOMO-HOMO Inversion in Persistent Radical Cations, <i>Journal of the American Chemical Society</i> , <b>146</b> , 12712-12722(2024). <a href="https://doi.org/10.1021/jacs.4c02404">DOI: 10.1021/jacs.4c02404</a>
DOI (論文・プロシーディング) [5] DOI (Publication and Proceedings)	Mengqing Chen, Iron-Catalyzed 5-Endo-Dig Synthetic Approach to Indenes and Its Bidirectional Extension to Narrow Bandgap $\pi$ -Systems, <i>ACS Catalysis</i> , <b>14</b> , 1375-1383(2024). <a href="https://doi.org/10.1021/acscatal.3c04961">DOI: 10.1021/acscatal.3c04961</a>
口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[1] Oral Presentations etc.	Development of novel organic electronic materials toward rational design of intra/intermolecular interactions Shota Fukuma 2023 / 10 / 2-3 Otsu Conference 2023 琵琶湖大津プリンスホテル
口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[2] Oral Presentations etc.	Zn-mediated Cyclization for Divergent Synthesis of Spiro-conjugated Molecules Shota Fukuma <sup>1</sup> , Rui Shang <sup>1</sup> , and Eiichi Nakamura <sup>1</sup> The 15th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-15) November 20th(Mon) - 23rd(Thu), 2023, Rihga Royal Hotel KYOTO, JAPAN

口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[3] Oral Presentations etc.	Structurally rigid trisphosphine Cu(I) complexes with sharp red emission enabled by introduction of strains ○Shota Fukuma, Rui Shang, Eiichi Nakamura 21st International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Toward Organic Synthesis 2023/7/24-28 Sheraton Wall Centre, Vancouver, Canada
口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[4] Oral Presentations etc.	Iron-Catalyzed C-H Activation and Cyclization of Oxime Ethers with Alkynes to Produce Isoquinoline Derivatives ○張岩、福間翔太、尚睿、中村栄一 第122回有機合成シンポジウム 2023/7/19-20 東京工業大学蔵前ホール
口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[5] Oral Presentations etc.	Iron-Catalyzed Aza-Annulative $\square$ -Extension with Alkynes using a Self-Oxidation Auxiliary Yan ZHANG, Shota FUKUMA, Rui SHANG, and Eiichi NAKAMURA The 15th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-15) November 20th(Mon) - 23rd(Thu), 2023, Rihga Royal Hotel KYOTO, JAPAN
口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[6] Oral Presentations etc.	Solution-processable ordered small molecular hole injection layers for perovskite quantum dot light emitting diodes Shota Fukuma, Wataru Sato, Akinori Takasugi, Pushi Wang, Rui Shang, and Eiichi Nakamura, Bowei Research Conference (BRC-4) 2024Jan3-5
口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[7] Oral Presentations etc.	Zn-mediated cyclization for divergent synthesis of spiro-conjugated molecules Shota Fukuma <sup>1</sup> , Rui Shang <sup>1</sup> , and Eiichi Nakamura <sup>1</sup> 基礎有機化学会 2023年9月12-14日 岡山コンベンションセンター
口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[8] Oral Presentations etc.	Zn-mediated Anionic Cyclization for Divergent Synthesis of Spiro-conjugated Molecules *○**Shota Fukuma*, Rui Shang, and Eiichi Nakamura CEMSupra 2024年1月, 東京大学本郷キャンパス (ポスター発表)
口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[9] Oral Presentations etc.	*○**福間* **翔太*, Rui Shang、中村 栄一 亜鉛を用いたカルボアニオン型環化反応による新規スピロ共役分子のダイバージェント合成 日本化学会第104春季年会 2024年3月 船橋 (口頭発表)
特許出願件数 Number of Patent Applications	0件
特許登録件数 Number of Registered Patents	0件