BL-1A/2017G082, BL-17A/2019G051

# キラル細孔に気体分子を吸着する結晶性ナフチレン大環状分子 Crystalline naphthylene macrocycles capturing gaseous small molecules in chiral nanopores

松野太輔<sup>1</sup>,福永健悟<sup>1</sup>,小林周平<sup>2</sup>, Parantap Sarkar<sup>2</sup>,佐藤宗太<sup>1</sup>,池田拓史<sup>3</sup>,磯部寛之<sup>1\*</sup> <sup>1</sup>東京大学大学院理学系研究科化学専攻,〒113-0033 東京都文京区本郷 <sup>2</sup>東北大学原子分子材料科学高等研究機構・東北大学理学研究科化学専攻, 〒980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉

<sup>3</sup>産業技術総合研究所 化学プロセス研究部門, 〒983-8551 仙台市宮城野区苦竹 Taisuke MATSUNO<sup>1</sup>, Kengo FUKUNAGA<sup>1</sup>, Shuhei KOBAYASHI<sup>2</sup>, Parantap SARKAR<sup>2</sup>, Sota SATO<sup>1</sup>, Takuji IKEDA<sup>3</sup> and Hiroyuki ISOBE<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, The University of Tokyo, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan <sup>2</sup>Advanced Institute for Materials Research (AIMR) and Department of Chemistry, Tohoku University, Aoba-ku, Sendai, 980-8578, Japan

<sup>3</sup>Research Institute for Chemical Process Technology, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Miyagino-ku, Sendai, 983-8551, Japan

# 1 <u>はじめに</u>

ナノメートルサイズの空孔を有する結晶は機能性物質として注目されている. 共役大環状分子からなる結晶性の多孔性材料では,空孔の化学組成やサイズ・形状の制御が可能であるため有用である.本研究では,ナフタレンの 1,6 位を連結した大環状分子である [*n*]cyclo-epi-naphthylene ([*n*]CeNAP) を合成し,その分子構造と空孔へのガス吸着能を解明した.

#### 2 実験

[*n*]CeNAP はニッケル錯体を用いるカップリング 反応によりワンポットで合成した(図 1).単結晶 を作成し,KEK PF BL17A 及び BL1A ビームライン の高輝度 X 線を用いて結晶構造解析を行った. [8]CeNAP については窒素ガス吸着実験によりその キラル空孔を解析した.



図 1. (*R<sup>m</sup>*)-[*n*]CeNAP の合成.

#### 3 結果および考察

[8]CeNAP, [10]CeNAP 及び[12]CeNAP は一次元の カラム状パッキング構造を有していた.例として [12]CeNAP の構造を図 2 に示した.[8]CeNAP につ いては窒素ガス吸着能とガス吸着時の分子構造につ いても明らかにし,窒素ガスが $C_2$ 対称のキラルな配 列を形成していることを明らかにした.



図 2. (R<sup>6</sup>)-[12]CeNAP のパッキング構造. 緑色は空孔 に取り込まれた溶媒分子.

### 4 <u>まとめ</u>

キラルな空孔を有する大環状分子[n]CeNAP を合成し、その多孔性結晶構造とガス吸着能を解明した.

#### 謝辞

本研究の一部は JST, ERATO (JPMJER1301), 科研費 (17H01033, 19H05376, 20K15239, 20H00375) 及び旭硝 子財団の支援を受けました.

## 参考文献

- T. Matsuno, K. Fukunaga , S. Kobayashi, P. Sarkar, S. Sato, T. Ikeda, H. Isobe, *Chem. Asian J.* 15, 3829-3835.
- \* isobe@chem.s.u-tokyo.ac.jp