

シクロパラフェニレン二重ナノフープ：
 固体状態における構造、ラメラ充填、C₆₀ 包接
 Cycloparaphenylene Double Nanohoop: Structure, Lamellar Packing, and
 Encapsulation of C₆₀ in the Solid State

Yong Yang¹, Shangxiong Huangfu^{2,3}, Sota Sato⁴, and Michal Juríček^{1,*}

¹Department of Chemistry, University of Zurich

Winterthurerstrasse 190, CH-8057 Zurich, Switzerland

²Laboratory for High Performance Ceramics, Empa
 Überlandstrasse 129, CH-8600 Dübendorf, Switzerland;

³Department of Physics, University of Zurich

Winterthurerstrasse 190, CH-8057 Zurich, Switzerland

⁴Department of Applied Chemistry, School of Engineering, The University of Tokyo
 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan

1 はじめに

炭素と水素だけからなる大環状芳香族分子は、特異な π 電子系を有するため、近年、熱心に研究されている。分子構造が巨大であるために、その構造解析は難しく、空孔に由来するディスオーダーや、軽元素で構成されることによる弱い回折強度、十分な大きさの結晶成長が困難、といった問題がある。

2 実験

合成された分子の結晶は $50 \times 10 \times 10 \mu\text{m}^3$ 、 $40 \times 20 \times 20 \mu\text{m}^3$ 程度で、ラボ機では測定できなかった。BL17A における高輝度な X 線光源と、高感度な PAD 検出器によって、95 K のクライオ条件下で良質な回折データを得ることができた。shelx による構造精密化の結果、固体状態における分子構造・C₆₀ フラーレンの包接構造、分子充填構造を明らかにすることができた[1]。

3 結果および考察

合成した分子を異なる溶媒で結晶化したところ、溶媒に依存して結晶中でのコンフォメーションが変化した。クロロホルム中で結晶化すると、狭く長い空孔構造が得られ (図 1a)、トルエン中で結晶化すると、広く短い空孔構造が得られた (図 1b)。さらに、C₆₀ フラーレンとの複合化によって、1:1 のモル比での包接構造が得られ、トルエン中で結晶化したところ、広く短い空孔構造にぴったりとフィットする形でフラーレンがはまっている様子がわかった。単結晶 X 線構造解析を使わないと、このような明確な固体中における分子構造、超分子錯体構造を解明することはできず、有用な情報が得られた。一分子中に 2 つの環構造を有するこの分子は、超分子錯体の基本骨格として用いることができ、また、半導体材料としての物性を示すことが明らかになった。

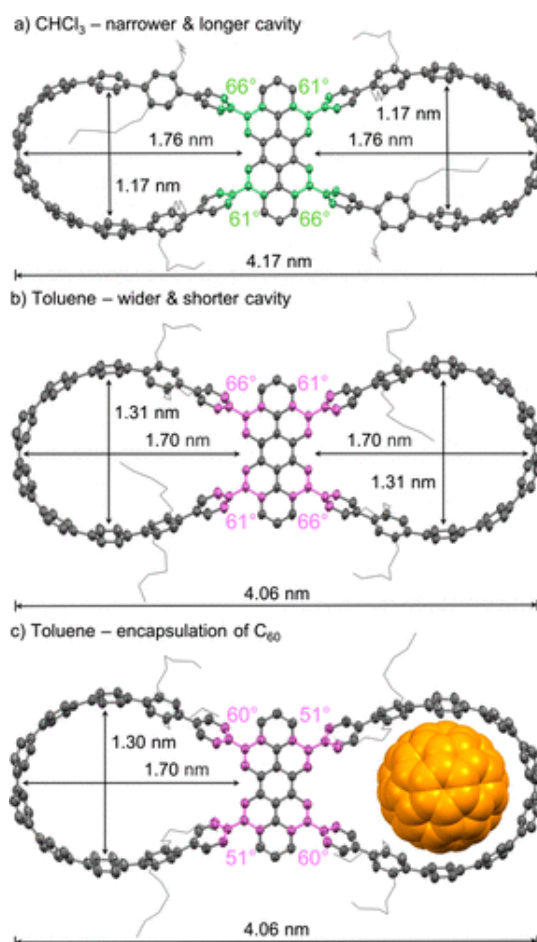


図 1 : 構造解析された炭化水素分子の構造。

4 まとめ

構造解析の難しい巨大有機分子の構造を、挿入光源型の X 線源を活用して明瞭に決定できた。・・・

参考文献

[1] Y. Yang, S. Huangfu, S. Sato and M. Juríček, *Org. Lett.* **23**, 7943-7948 (2021).

* michal.juricek@chem.uzh.ch