

ピリジン及びピロール窒素を内包した $C_{552}H_{496}N_{24}$ 組成の周期孔を有したナノチューブ分子

A defective nanotube molecule of $C_{552}H_{496}N_{24}$ with pyridinic and pyrrolic nitrogen atoms

池本晃喜^{1*}, 原田昌太郎¹, 梁承民¹, 松野太輔¹, 磯部寛之^{1*}

¹ 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 7-3-1

Koki IKEMOTO^{1*}, Shotaro HARADA¹, Seungmin YANG¹, Taisuke MATSUNO¹,
and Hiroyuki ISOBE^{1*}

¹ Department of Chemistry, The University of Tokyo
Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

1 はじめに

窒素ドーブ型カーボンナノチューブは、炭素原子のみからなるカーボンナノチューブとは異なる物性を示すことから大きな注目を集めている。しかしながら、カーボンナノチューブは混合物であるため、窒素ドーブが及ぼす効果について、構造に立脚して精密な議論を行うことは不可能であった。このような背景のもと、我々は近年、8個のピリジン窒素を有する窒素ドーブ型ナノチューブ分子 (NpNT 1) の合成に成功し、そのアクセプター性を実験的に証明した。本研究では、8個のピリジン窒素に加え、新たに16個のピロール窒素を有するナノチューブ分子 (NpNT 2) を合成し、その電子・光学物性を実験的に明らかにした (図 1a)。

2 実験

窒素ドーブ型フェナインナノチューブ (NpNT 2) は、既報のフープ状分子に対し、カルバゾールを有するベンゼン誘導体をカップリングさせることで合成した。NMR 測定および質量分析から、分子式 $C_{552}H_{496}N_{24}$ 、分子量 7466 を有する NpNT 2 の生成を確認した。この分子は、最大蛍光波長が溶媒の極性が高くなるほど赤方偏移することが分かり、CT 発光特性を有することが分かった。最終的な分子構造は、トルエン溶液にメタノール蒸気を拡散させることで、NpNT 2 の単結晶を得て、KEK PF BL17A ビームラインの高輝度 X 線を用いて測定を行うことで明らかにすることができた。

3 結果および考察

結晶構造解析の結果、3 nm に及ぶ NpNT 2 の筒状構造を明らかにした (図 1b)。カルバゾール部位は筒状骨格に対して十字型の構造をとっていた。興味深いことに、カルバゾールの水素と筒状構造に埋め込まれたピリジン窒素が相互作用することで、ヘリカルなパッキング構造を取ることが分かった (図 1c)。

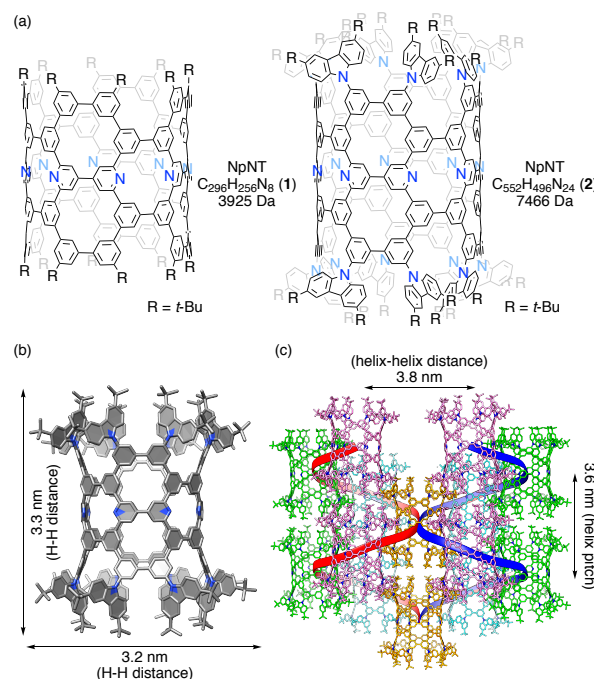


図 1. (a) 窒素ドーブ型ナノチューブ分子 NpNT. (b) 単結晶 X 線構造. (c) パッキング構造.

4 まとめ

ピリジン及びピロール窒素を有する窒素ドーブ型ナノチューブ分子 NpNT 2 の合成に成功し、その構造・電子的特性を実験的に明らかにした。

謝辞

本研究は科研費 (20H05672, 20K15254) 及び JSPS 特別研究員奨励費 (21J11391) の支援を受けました。

参考文献

[1] K. Ikemoto, S. Harada, S. Yang, T. Matsuno, H. Isobe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202114305.

* kikemoto@chem.s.u-tokyo.ac.jp

* isobe@chem.s.u-tokyo.ac.jp