

キラルな細孔に気体分子を吸着する結晶性ナフチレンマクロサイクル

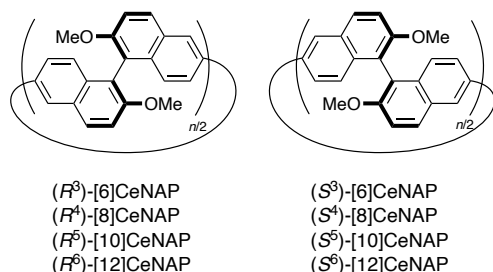
(東大院理¹・東北大院理²・東北大 AIMR³・産業技術総合研究所⁴) ○福永 健悟¹・松野 太輔¹・小林 周平²・Parantap Sarkar^{2,3}・佐藤 宗太¹・池田 拓史⁴・磯部 寛之¹
Crystalline naphthylene macrocycles capturing gaseous small molecules in chiral nanopores
(¹Department of Chemistry, The University of Tokyo, ²Department of Chemistry, Tohoku University, ³Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University, ⁴National Institute of Advanced Industrial Science and Technology) ○Kengo Fukunaga,¹ Taisuke Matsuno,¹ Shuhei Kobayashi,² Parantap Sarkar,^{2,3} Sota Sato,¹ Takuji Ikeda,⁴ Hiroyuki Isobe¹

Crystals with nanometer-sized discrete pores have attracted much attention as functional materials. In this study, a series of chiral naphthylene macrocycles, $[n]$ cyclo-epi-naphthylenes ($[n]$ CeNAPs) were synthesized. In single crystals, $[n]$ CeNAP ($n = 8, 10, 12$) stack to form chiral one-dimensional nanopores of columnar assemblies. A one-dimensional nanopore of $[8]$ CeNAP adsorbed gaseous nitrogen molecules. An interesting C_2 -chiral arrangements of nitrogen molecules in the pore were revealed by in-situ synchrotron powder X-ray diffraction analyses.

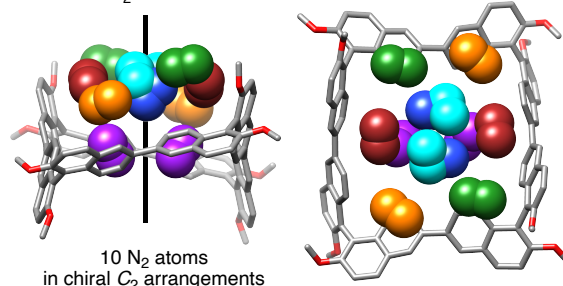
Keywords : Adsorption; Chirality; Macrocycles; Microporous Material; X-Ray Diffraction

ナノメートルサイズの細孔を持つ多孔質材料は有用な機能性物質である。中でも大環状分子が積層して生じる結晶性多孔質材料は、分子構造により細孔サイズなどの特性が制御でき、機能性開拓が容易となると期待される。本研究ではナフチレンを構築単位とする大環状化合物、 $[n]$ シクロ-エピ-ナフチレン ($[n]$ CeNAP) を合成し、キラルな空孔を有する特異な結晶性多孔質材料となることを見出した。X線結晶構造解析の結果、 (R^m) - $[n]$ CeNAP は多角形構造を有し、 (R^4) - $[8]$ CeNAP, (R^5) - $[10]$ CeNAP, (R^6) - $[12]$ CeNAP は結晶中でカラム状に積層した一次元細孔を形成することを見出した。とくに (R^4) - $[8]$ CeNAP の多孔性構造は安定であり、結晶内の溶媒分子を取り除いても一次元細孔が維持された。 (R^4) - $[8]$ CeNAP の一次元細孔は窒素ガスの吸脱着に利用可能であり、放射光を利用した in-situ 粉末 X 線回折実験により、吸着された窒素分子が細孔内で C_2 対象な空間を占めるキラル配列を示すことを明らかにした。

(a) Molecular structures of $[n]$ CeNAP



(b) Crystal structure of N_2 -encapsulating (R^4) - $[8]$ CeNAP



1) T. Matsuno, K. Fukunaga, S. Kobayashi, P. Sarkar, S. Sato, T. Ikeda, H. Isobe, *Chem. Asian J.* **2020**, *15*, 3829.