

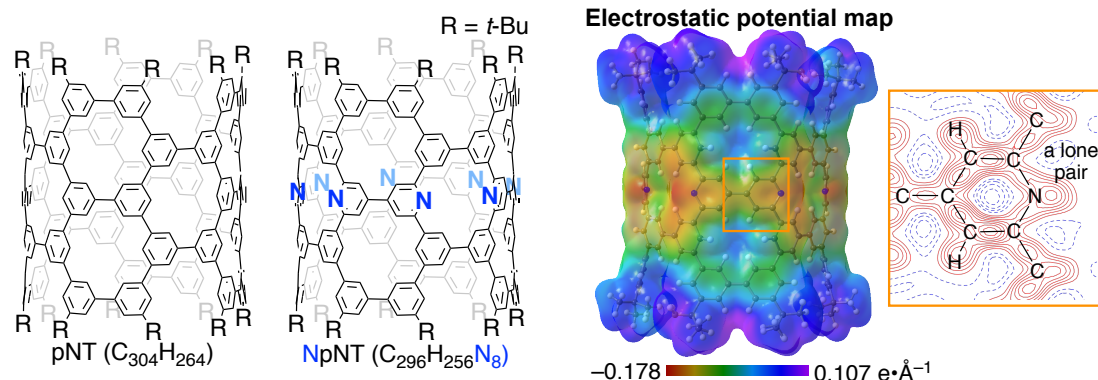
周期孔を有する窒素ドーピング型ナノチューブ分子

(東大院理¹・JST ERATO²・名大多元数理³・東北大 AIMR⁴・東北大院理⁵) ○YANG Seungmin¹・池本 晃喜^{1,2}・内藤 久資³・小谷 元子^{4,5}・佐藤 宗太^{1,2}・磯部 寛之^{1,2}
 A nitrogen-doped nanotube molecule with atom vacancy defects (¹*Department of Chemistry, The University of Tokyo*, ²*JST ERATO*, ³*School of Mathematics, Nagoya University*, ⁴*Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University*, ⁵*Mathematical Institute, Tohoku University*)
 ○Seungmin YANG,¹ Koki Ikemoto,^{1,2} Hisashi Naito,³ Motoko Kotani,^{4,5} Sota Sato,^{1,2} Hiroyuki Isobe^{1,2}

We synthesized a nitrogen-doped nanotube molecule by embedding eight nitrogen atoms at designated positions of a gigantic cylindrical molecule ($C_{296}H_{256}N_8$). An original hydrocarbon nanotube phenine nanotube molecules (pNT) was synthesized by assembling 40 benzene panels in a cylindrical shape, and the present study demonstrated the use of alternative pyridine panels as the fundamental unit to design a nitrogen-doped phenine nanotube (NpNT). The synthesis was accomplished in 10 steps from dibromopyridine to achieve 1.4% overall yield. State-of-art X-ray diffraction analyses of a single crystal revealed the cylindrical molecular structure as well as lone-pair electrons of nitrogen atoms. In addition, optical measurements and theoretical calculations revealed interesting effects of the nitrogen doping.

Keywords : *Finite Nanotubes; Nitrogen Doping; Macrocycles; Coupling*

特定の位置に窒素原子をドーピングした巨大な筒状分子 ($C_{296}H_{256}N_8$) を合成した¹⁾。1,3,5-三置換ベンゼンを構成単位としたナノチューブ分子「フェナインナノチューブ (pNT)」²⁾ は 40 枚ベンゼンを用いて設計していたが、本研究ではピリジンパネルを用いることで窒素ドーピング型フェナインナノチューブ (NpNT) を簡便に合成できることを明示した。NpNT の合成は、ジブロモピリジンを原料とした 10 段階の反応により、総収率 1.4% で実現した。最先端単結晶 X 線構造解析を活用することで、直径・高さ 2 nm の巨大筒状分子構造を明らかにするとともに、窒素の孤立電子対に由来する局在電子を可視化した。光学測定および理論計算により、窒素ドーピングの興味深い影響を明らかにした。



1) K. Ikemoto, S. Yang, H. Naito, K. Kotani, S. Sato, H. Isobe, *Nat. Commun.* **2020**, *11*, 1807.

2) Z. Sun, K. Ikemoto, T. M. Fukunaga, T. Korestune, R. Arita, H. Isobe, *Science* **2019**, *363*, 151.