

ピレン/ヒドロピレン誘導体の水素結合性固溶体フレームワーク

(阪大院基礎工) ○橋本泰利・桶谷龍成・久木一朗

Hydrogen-bonded solid solution frameworks based on pyrene/hydropyrene systems (*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*) ○Taito Hashimoto, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki¹

Hydrogen-bonded organic frameworks (HOFs) are porous materials composed of molecules assembled through hydrogen bonding. In this study, we demonstrated construction of solid solution HOFs using hexahydropyrene and pyrene derivatives (**CP-Hp** and **CP-Py**, respectively). Single crystal X-ray diffraction analysis revealed the molecules formed a HOF with a rhombic void through complementary hydrogen bonding of carboxy groups. Remarkably, a crystal structure of the HOF containing both **CP-Hp** and **CP-Py** was successfully solved with a disordered model (Figure 1a). From structural analyses of crystals obtained from mixed solutions of **CP-Hp** and **CP-Py** in various ratios, it was revealed that the component ratio in crystals is appropriate the same as that in the initial solution (Figure 1b). Furthermore, microscopic Raman spectroscopy on single crystals revealed that two components are distributed inhomogeneously in the crystal¹⁾.

Keywords : Porous materials; Hydrogen-bonded organic framework; Solid solution; Co-crystallization

Hydrogen-bonded organic framework (HOF) とは、分子が可逆的な水素結合によって連結して構築した多孔性有機材料である。本研究では、カルボキシフェニル基をもつヘキサヒドロピレン誘導体 (**CP-Hp**) およびピレン誘導体 (**CP-Py**) を用いて固溶体 HOF の構築の概念実証を行った。単結晶 X 線構造解析の結果、分子はカルボキシ基の相補的な水素結合により、菱形の空孔をもつ HOF を形成していた。さらに、コア部分を **CP-Hp** と **CP-Py** のディスオーダー構造として解析でき、結晶中の 2 つの成分の構成比が明らかになった (図 1a)。**CP-Hp** と **CP-Py** を様々な比率で結晶化して得られた単結晶の構造解析の結果、単結晶中の成分比率は初期溶液の混合比率とほぼ同じであることが明らかになった (図 1b)。さらに、単結晶を用いた顕微ラマン分光によって、結晶中の 2 つの成分は不均一に分布していることが明らかになった¹⁾。

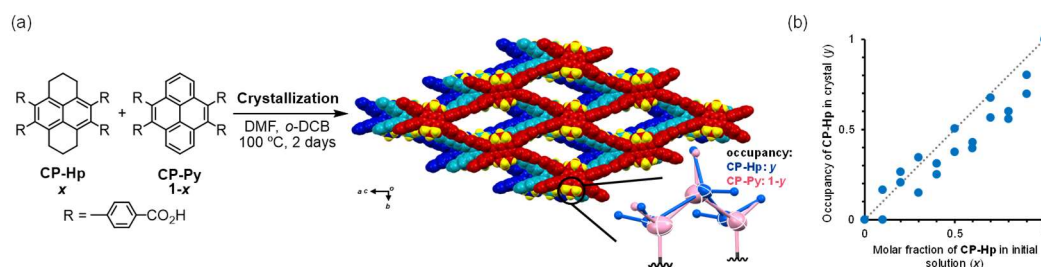


Figure 1. (a) Formation of a solid solution framework consisted of **CP-Hp** and **CP-Py**. (b) Relationship between the occupancy of **CP-Hp** in the crystal and the molar fraction of **CP-Hp** in the initial solution.

1) T. Hashimoto, R. Oketani, M. Nobuoka, S. Seki, I. Hisaki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, 62, e202215836.