

ピリジン及びピロール窒素を有する $C_{552}H_{496}N_{24}$ 組成の周期孔ナノチューブ

(東大院理¹) ○原田昌太郎¹・池本晃喜¹・梁承民¹・松野太輔¹・磯部寛之¹

A Defective Nanotube Molecule of $C_{552}H_{496}N_{24}$ with Pyridinic and Pyrrolic Nitrogen Atoms
(¹Department of Chemistry, The University of Tokyo) ○Shotaro Harada,¹ Koki Ikemoto,¹ Seungmin Yang,¹ Taisuke Matsuno,¹ Hiroyuki Isobe¹

Doped in graphitic networks, nitrogen atoms modulate electronic and chemical properties of carbon nanotubes. The modulation is suggested to depend on characters of nitrogen atoms, and there are three major types of nitrogen dopants: pyridinic, pyrrolic, and graphitic nitrogen. However, as the carbon nanotubes are mixtures of various structures, correlating atomic-level structures with the modulate properties has been difficult. We recently synthesized a nitrogen-doped phenine nanotube (NpNT) (**1**) and disclosed a role of pyridinic nitrogen as acceptors. In this work, we additionally introduced pyrrolic nitrogen. A gigantic nanotube molecule (NpNT, **2**) of $C_{552}H_{496}N_{24}$ having 8 pyridinic and 16 pyrrolic nitrogen atoms was thus synthesized. Donor/acceptor contributions of two nitrogen types as well as a unique helical packing structure in a single crystal were revealed.

Keywords : Nanotube; Nitrogen doping; Crystal engineering

カーボンナノチューブ内に窒素原子を導入すると、電子的・化学的性質が変化する。この変化は、窒素原子の性質に依存すると考えられており、窒素原子はピリジン、ピロール、グラファイトの三種に大別されている。しかしカーボンナノチューブは様々な構造を持つ混合物であるため、原子レベルの構造と性質の変化を相関させた議論は困難となっていた。我々は最近、1,3,5-三置換ベンゼン環（フェナイン）を活用し、ピリジン窒素がドーピングされたフェナインナノチューブ分子（NpNT, **1**）を合成し、ピリジン窒素がアクセプターとなっていることを明らかにした¹。今回、さらにピロール窒素を導入した。すなわち、8 個のピリジン窒素、16 個のピロール窒素を有する分子組成 $C_{552}H_{496}N_{24}$ の巨大なナノチューブ分子（NpNT, **2**）を合成した (Figure 1)²。窒素のドナー性、アクセプター性および結晶中のヘリカルパッキング構造を明らかにした。

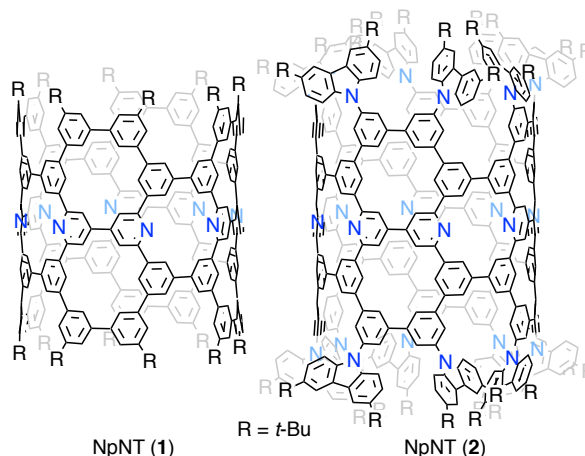


Figure 1. Structures of NpNT

1) K. Ikemoto, S. Yang, H. Naito, M. Kotani, S. Sato, H. Isobe, *Nat. Commun.* **2020**, *11*, 1807. 2) K. Ikemoto, S. Harada, S. Yang, T. Matsuno, H. Isobe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, published online, doi:10.1002/anie.202114305.