



## フラーレン二量体-カーボンナノリング複合体の構造解析

尾崎 仁亮<sup>1</sup>、坂本 裕俊<sup>1</sup>、伊丹 健一郎<sup>1</sup>

1 名古屋大学 大学院理学研究科 ERATO 伊丹分子ナノカーボンプロジェクト

### 1. 背景と研究目的

シクロパラフェニレン(CPP)は複数のベンゼン環がパラ位でつながった環状分子であり、カーボンナノリングとも呼ばれる。径の異なる CPP、および、様々な官能基が導入された CPP を選択的に合成することができ、新たなナノカーボン物質として注目されている。CPP は本質的に中空をもつ構造であり、その空間に他の化学種を取り込めることに我々は着目し、多孔性材料としての応用展開を試みている。

すでに、[10]CPP とフラーレン C<sub>60</sub> の複合体については報告がなされている。本研究では、C<sub>60</sub> の二量体(ダンベルフラーレン)C<sub>120</sub> と [10]CPP の複合体を合成し、その配列変化、および、フラーレンの周囲を CPP で覆うことにより、未踏のリニアポリフラーレン合成への知見を得ることを目的とした。

### 2. 実験内容

[10]CPP ⊂ C<sub>120</sub> の単結晶サンプルは、[10]CPP と C<sub>120</sub> をトルエン中に溶解させた後に静置することで得られた。単結晶サイズは 200 μm × 100 μm 程度であり、ラマンスペクトルの測定から、作成した単結晶中にダンベルフラーレンおよび[10]CPP の両方が含まれていることを確認している。

顕微鏡下で結晶性の良い単結晶を選別し、2つの単結晶について、 $\lambda = 1.12 \text{ \AA}$  の X 線を用い、以下の条件で回折測定を行った。結晶 1:  $\varphi = -55 \sim 125^\circ$ 、 $0.5^\circ @ 10 \text{ sec/image}$ 、360 images。結晶 2:  $\varphi = 0 \sim 180^\circ$ 、 $0.5^\circ @ 7 \text{ sec/image}$ 、360 images。



Fig.1 カーボンナノリング[10]CPP-ダンベルフラーレン C<sub>120</sub> 複合体の合成スキーム

### 3. 結果および考察

結晶 1、2 ともにシャープな回折スポットを示したが、直接法によりその結晶構造を導き出すことはできなかった。回折イメージを注視すると、幾つかの結晶相が重なったようなパターンを示すものがあった。選別した結晶が見た目では単結晶のようであるが、密に積層していたものであったためと考えられる。今後は、結晶選別の根拠を確立するとともに、 $\chi$  軸変化の測定も行うことにより、高 completeness の回折データを得ることによって、構造解析の確度を高めたい。

### 4. 参考文献

- "Cycloparaphenylene as a molecular porous carbon solid with uniform pores exhibiting adsorption-induced softness" H. Sakamoto, T. Fujimori, X.-l. Li, K. Kaneko, K. Kan, N. Ozaki, Y. Hijikata, S. Irle, K. Itami *Chem. Sci.*, **2016**, 7, 4204–4210.
- "Electro-activated conductivity and white light emission of a hydrocarbon nanoring-iodine assembly" N. Ozaki, H. Sakamoto, T. Nishihara, T. Fujimori, Y. Hijikata, R. Kimura, S. Irle, K. Itami *Submitted*.