

## 気相化学種を活用した材料科学 – $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}$ クラスターの単離と凝縮系での物性探索 –

(東北大理<sup>1</sup>・東北大院理<sup>2</sup>・東北大学際研<sup>3</sup>・京大化研<sup>4</sup>・名市大院理<sup>5</sup>)  
 ○金野 夏実<sup>1</sup>・上野 裕<sup>2,3</sup>・菅野 学<sup>2</sup>・橋川 祥史<sup>4</sup>・岡田 洋史<sup>2</sup>・  
 青柳 忍<sup>5</sup>・村田 靖次郎<sup>4</sup>・美齊津 文典<sup>2</sup>

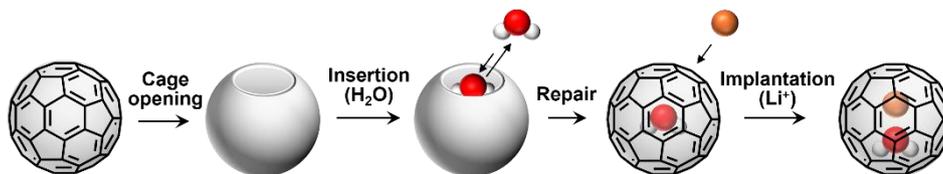
Materials science with gas-phase clusters: The first observation of a  $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}$  cluster in the condensed phase

(<sup>1</sup>Faculty of Science, Tohoku University, <sup>2</sup>Graduate School of Science, Tohoku University, <sup>3</sup>Frontier Research Institute for Interdisciplinary Science (FRIS), Tohoku University, <sup>4</sup>Institute for Chemical Research, Kyoto University, <sup>5</sup>Department of Information and Basic Science, Nagoya City University) ○Natsumi Konno,<sup>1</sup> Hiroshi Ueno,<sup>2,3</sup> Manabu Kanno,<sup>2</sup> Yoshifumi Hashikawa,<sup>4</sup> Hiroshi Okada,<sup>2</sup> Shinobu Aoyagi,<sup>5</sup> Yasujiro Murata,<sup>4</sup> Fuminori Misaizu<sup>2</sup>

The inner space of fullerenes is known for its inert atmosphere, where even ultra-unstable species, such as a nitrogen atom, can be stabilized due to the perfect steric protection. In this study, we demonstrate the in-situ construction of the  $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}$  cluster inside  $\text{C}_{60}$ , achieved by sequentially inserting an  $\text{H}_2\text{O}$  molecule followed by  $\text{Li}^+$  using both organic synthetic method<sup>1)</sup> and ion implantation process.<sup>2)</sup> The encapsulated  $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}$  cluster exhibits remarkable stability, enabling structural analysis through solution NMR and X-ray crystallography. This approach offers potential applications for shifting gas-phase science towards material applications.

*Keywords: Gas-phase cluster; Endofullerene; Pseudo gas-phase; Pseudo high pressure*

フラーレンの内部空間は超不活性空間として知られており、内包した化学種の構造および物性の安定化を可能とする。この空間内における自在な化学種の構築が実現できれば、未踏物性探索へ向けた多角的なアプローチに繋がると期待される。例えば気相クラスターのような不安定化学種に対して、凝縮系物質科学の豊富な測定を適用することができる可能性を秘めている。本研究では、有機合成法<sup>1)</sup>とプラズマイオン照射法<sup>2)</sup>を用いて  $\text{C}_{60}$  に段階的に原子・分子を挿入することで、 $\text{C}_{60}$  内部空間における  $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}$  クラスターのその場構築を試みた。 $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}$  は、過去に気相実験において赤外スペクトルが測定されている系である<sup>3)</sup>。本手法によって得られた、 $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}$  を内包した  $\text{C}_{60}$  ( $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}@\text{C}_{60}$ ) の構造を、溶液 NMR および単結晶 X 線構造解析により決定した。また、単離精製プロセスおよび構造解析の時間スケール (~1 か月) において試料の分解や内包化学種の脱離等は確認されず、 $\text{Li}^+\text{-H}_2\text{O}$  は当該空間において安定な化学種として存在可能であることがわかった。



1) Y. Hashikawa and Y. Murata, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **96**, 943 (2023). 2) S. Aoyagi *et al.*, *Nature Chem.* **2**, 678 (2010). 3) T. D. Vaden *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 3078 (2006).