

らせん状多環芳香族分子の超分子組織化と分光特性

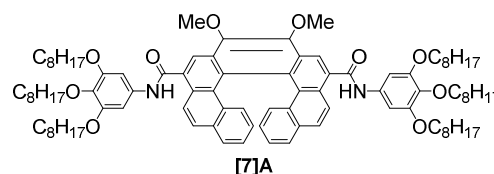
Investigation on Supramolecular Assembly of Helical Polyaromatic Hydrocarbons

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 伊藤 夏輝

背景と目的

芳香族化合物の超分子集合体は、 π 軌道の重なりによる電気伝導性のために、ナノスケールの電子材料として、応用が期待される。当研究室では、アミド基を持つ[7]ヘリセン誘導体[7]A が、板状の集合体を形成することを TEM 観察から確認した。一方で、この結果からでは、分子同士がどのようにパッキングしているかという情報を得ることは困難である。

そこで、Forcite による MM/MD 計算を用いることで、[7]A の安定なパッキングを調査し、[7]A の骨格及び側鎖が持つ影響を比較することを目的とした。



検討内容

化合物[7]A を 4 分子並べ、Forcite の MM/MD 計算からエネルギーの比較を行った。初期構造の分子は、芳香環どうしの π - π 相互作用が最も強く働くよう、芳香環が平衡になるように配置した。また、隣接する[7]A の末端の環が (a) 全て同じ方向を向く (b) 上から見て 90°ずつ時計回りに回転 (c) 上から見て 180°ずつ回転 (d) 上から見て 90°ずつ反時計回りに回転させた 4 種類の初期構造を作成した。この初期構造に対して、Forcite (Forcefield: COMPASS, Quality: Ultra-fine) で Geometry Optimization を行った。その後、Dynamics (Ensemble: NVT, Time step: 1.0 fs, Total simulation time: 20 ps) を行ったが、エネルギーは振動し完全には収束しなかった。そこで、この最終構造からもう一度同条件の Dynamics を行い、Tot. energy の Average から構造の安定化エネルギーの評価を行った。

結果

この結果、末端の芳香環が同方向を向く構造(a)からの計算が最も安定なエネルギーを示した(表 1)。しかし、計算後のヘリセン骨格の位置は計算前から大きく変化しない。

表 1 MD 計算の平均エネルギー

初期構造	a	b	c	d
平均エネルギー(kcal/mol)	3517.926	3633.516	3530.069	3633.516

考察

計算の結果、安定な超分子構造が示唆されたが、全ての計算において初期構造と MM/MD 計算後の構造の差が大きく現れなかった。このため、真の安定構造を得られているか判断を行うことができない。このことから、さらに多くの初期構造を検討するか、計算手法について検討を行う必要があると考えられる。