平成28年度　　京都大学化学研究所　スーパーコンピュータシステム　利用報告書

サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト—ゲスト化学の研究
Host-guest Chemistry of Cycloparaphenylenes with Different Diameters

京都大学化学研究所 材料機能化学研究系 高分子制御合成研究領域　　橋本　士雄磨

研究成果概要

我々は，π 共役分子，中でも曲面 π 共役系を有する分子が積層した高次構造に興味を持って研究を行なっている。バッキーオニオンや多層カーボンナノチューブなど，積層した曲面間で働いている π-π 相互作用や，その構造がどのような要因により形成されるかについては必ずしも明らかではなく，これらの解決のためには，凹凸を持つ曲面 π 共役分子間の分子レベルでの相互作用の理解が重要であると考えている。そこで本研究では，京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し，多層曲面 π 共役炭素材料のモデル分子となりうるシクロパラフェニレン（CPP）錯体の包接挙動について，理論計算による検討を行なった。

相互作用が予想される[n]CPP と[n+5]CPP（n = 5-8, 10）との包接錯体について，DFT 計算（ωB97X-D/6-31G*）による構造最適化計算を行なったところ，n が 6 以上の場合，ホスト CPP とゲスト CPP の π 共役面が斜めに交差する，Planetary orbit 型の構造が最安定構造として得られた。一方、n が 5 の場合にのみ、平行に少しずれた Russian doll 型の構造が得られ、Planetary orbit 型よりもわずかに安定であることがわかった。これは[5]CPP の場合では Russian doll 型に包接された際に相互作用により得られるエネルギーが、包接に伴う構造変化による歪みエネルギーを上回ったためと考えている。今後，これらの錯体の結晶化を試み，単結晶 X 線回折によりその結晶構造も明らかにすることで，理論との両面から包接挙動について解析を進める予定である。

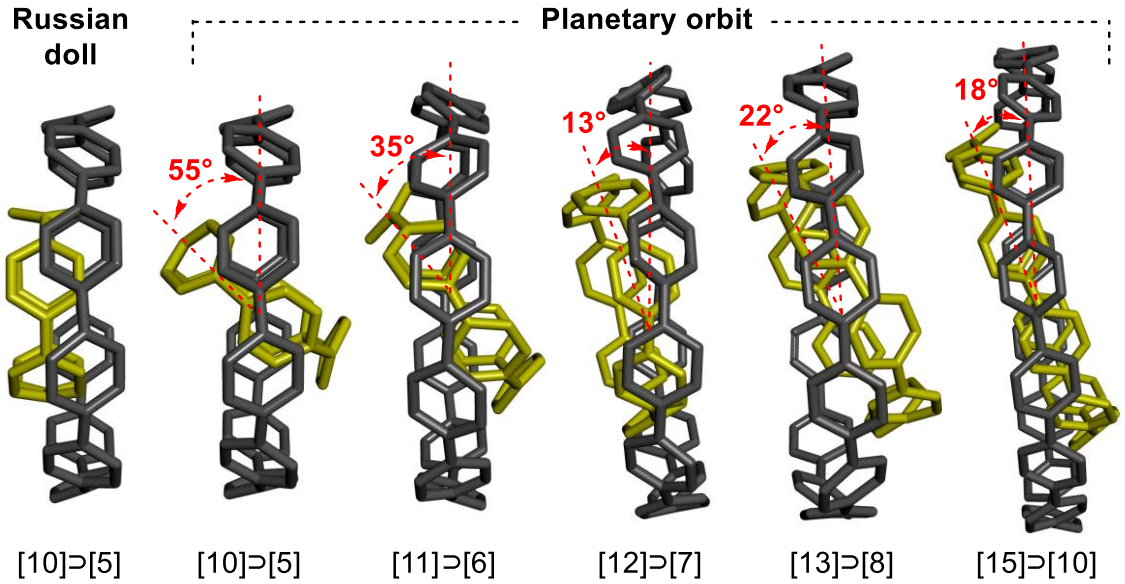

図 1. [n + 5]CPP⊃[n]CPP の構造