

ハロベンゼンと二酸化炭素との分子間相互作用の解析

Analysis of intermolecular interaction between halobenzene and carbon dioxide

京都大学 大学院人間・環境学研究科 相関環境学専攻 分子・生命環境論講座
津江 広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に広く適用可能なため、古くから研究され、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機分子性結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。その研究過程において、N末端を保護した BocGly-L-Phe（以下、**1**と略記。図1）の単結晶が、二酸化炭素を高選択的に吸着することが明らかになっている。

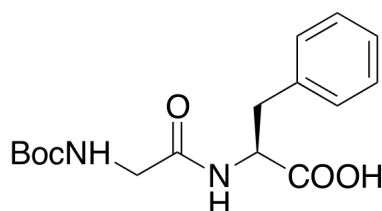


図1 **1**の分子構造

本研究では、**1**が示す二酸化炭素に対する親和性をより向上させることを目的として、側鎖フェニル基へのハロゲン基の導入の効果を理論面から評価するため、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを用いて、モデル化合物としての各種ハロベンゼンと二酸化炭素との分子間相互作用についての解析を行った。

具体的には、Gaussian 16を用いてベンゼン、フルオロベンゼン、クロロベンゼン、ブロモベンゼン、二酸化炭素の構造最適化をMP2レベルで行った後、ベンゼンと二酸化炭素ならびに各ハロベンゼンと二酸化炭素の間の距離および配向を変化させながら、それらに働く分子間相互作用エネルギーをMP2レベルで計算した。基底関数重なり誤差については、counterpoise法により補正した。その結果、ハロベンゼンの方が、ベンゼンよりも二酸化炭素と効果的に相互作用することが分かった。また、最安定構造を比較したところ、ハロベンゼンと二酸化炭素の間の距離および配向については、ハロゲン基の種類により違いが見られたものの、分子間相互作用エネルギーについては、ハロゲン基の違いによって大きくは左右されないことが明らかとなった。