

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、 $\pi$  共役分子、中でも曲面  $\pi$  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  $\pi$ - $\pi$  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  $\pi$  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。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  $\pi$  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。

NMR 測定を用いて、実験的に相互作用が観測された  $[n]$ CPP と  $[n+5]$ CPP ( $n = 5-8, 10$ ) との各包接錯体について、DFT 計算 ( $\omega$ B97X-D/6-31G\*) により Kohn-Sham 軌道を可視化した。結果、一部ではホストとゲスト CPP 両方に広がる軌道が見られた。このことは、ホスト-ゲスト分子間での電子的な相互作用の存在を示唆しており、これらを利用した電子材料などとしての応用も将来的に期待できると考えられる。

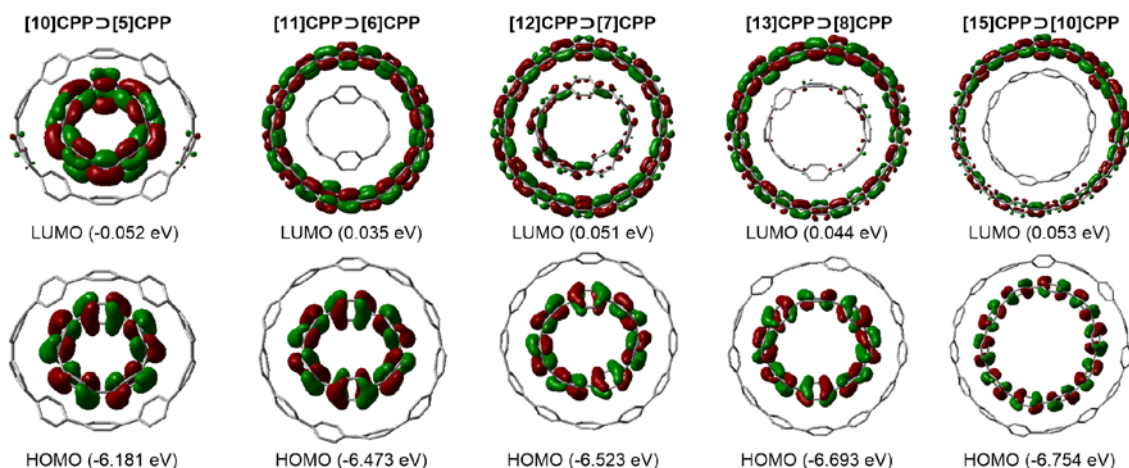


図 1.  $[n+5]$ CPP $\supset$  $[n]$ CPP の最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO)

発表論文 (謝辞あり)

“Shortest Double-Walled Carbon Nanotubes Composed of Cycloparaphenylenes”

Hashimoto, S.; Iwamoto, T.; Kurachi, D.; Kayahara, E.; Yamago, S. *ChemPlusChem* **2017**, *82*, 1015-1020 (vip article).