

C₆₀ 表面に働く非共有結合性相互作用の定量的な評価

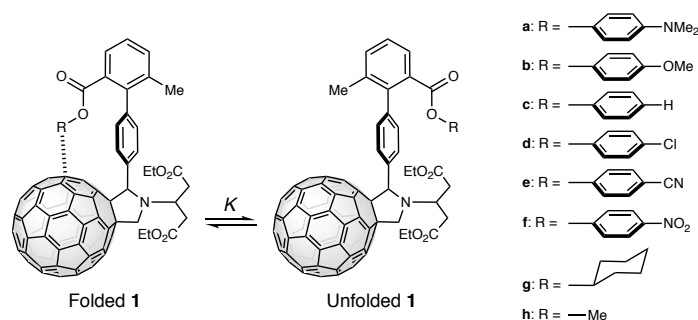
(学芸大教) ○山田 道夫・成田 陽菜・前田 優

Quantitative Evaluation of Noncovalent Interactions at the C₆₀ Surface (¹*Department of Chemistry, Tokyo Gakugei University*) ○Michio Yamada,¹ Haruna Narita,¹ Yutaka Maeda¹

Fullerenes are unique molecules with spherical hydrophobic structures and curved π -electron systems, and they are expected to find widespread use in a variety of applications in the materials science and medicinal chemistry fields. Quantitative investigations of the noncovalent interactions at the fullerene surface, which are often very weak, are essential for understanding the assembled molecular systems of fullerenes as well as its molecular recognition events. In this study, we designed, synthesized, and characterized the first model system of a fullerene-based molecular balance to quantitative analyze the noncovalent interactions at the C₆₀ surface. We found two conformers corresponding to the folded and unfolded states are observable based on their ¹H NMR spectra, allowing us to determine the thermodynamic parameters corresponding to the noncovalent interactions occurring on the fullerene surface.

Keywords : Conformational Analysis; Electrostatic Interactions; London Dispersion Force; π - π Interactions; Fullerenes

C₆₀ は球状の π 電子共役系構造をもつ特異な疎水性分子であり、物質化学や医薬品化学などの分野で広く注目されている。C₆₀ からなる分子集合体や C₆₀ の分子認識における性質を理解する上では、C₆₀ 分子の表面に働く非共有結合性相互作用を定量的に評価することが重要であるが、非常に弱い分子間力の計測は容易ではない。本研究ではねじり天秤分子を設計・合成し、C₆₀ 表面と種々の置換基との間に働く相互作用を計測・評価したので報告する¹⁾。本研究で設計・合成したねじり天秤分子 (**1**) について、Folded 型配座および Unfolded 型配座からなる二種類の配座異性体の相互変換が ¹H NMR から観測することができた。そこで、この配座異性の解析により、フラーレン表面と種々の置換基の間に働く相互作用に対応する熱力学パラメータの算出を行い、それらは非常に弱いものの、観測可能であることが明らかとなった。



1) A fullerene-based molecular torsion balance for investigating noncovalent interactions at the C₆₀ surface, M. Yamada, H. Narita, Y. Maeda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 16133.