

## 分子骨格内部が官能基化されたお椀型芳香族炭化水素によるフラーレン認識

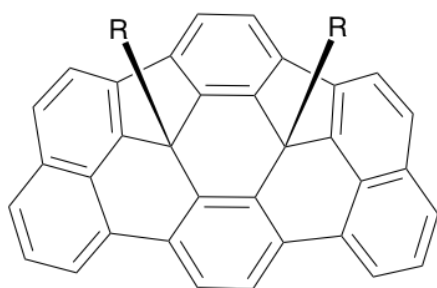
(名大院工<sup>1</sup>) ○竹尾 佳紘<sup>1</sup>・加藤 将輝<sup>1</sup>・福井 識人<sup>1</sup>・忍久保 洋<sup>1</sup>

Recognition of fullerenes with internally functionalized bowl-shaped aromatic hydrocarbons  
(<sup>1</sup>*Graduate School of Engineering, Nagoya University*) ○Yoshihiro Takeo,<sup>1</sup> Masaki Kato,<sup>1</sup>  
Norihito Fukui,<sup>1</sup> Hiroshi Shinokubo<sup>1</sup>

Reversible and selective molecular recognition by non-covalent bonding is not only the essence of biological functions, but also useful for the creation of functional materials. Bowl-shaped aromatic hydrocarbons effectively capture fullerenes. The current strategies for the enhancement of association constants are 1) increasing the electron-donating ability of the host and 2) decreasing the loss of entropy upon complexation. Recently, we have synthesized internally functionalized bowl-shaped aromatic hydrocarbons.<sup>1</sup> Here, we investigated their association behaviors with fullerenes to evaluate the effect of internal substituents on molecular recognition.

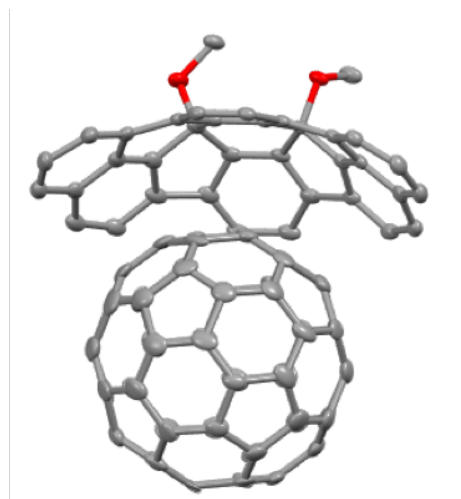
**Keywords :** *molecular recognition; fullerenes; bowl-shaped molecule; aromatic hydrocarbons; substitution effect*

非共有結合による可逆的かつ選択的な分子認識は生体機能の本質であり、機能性材料の創出にもつながる。フラーレンの認識には、お椀型の芳香族炭化水素をホストとして用いるのが適切である。この際、会合能を向上させる分子設計としては、電子供与性の向上や、エントロピーロスの減少が効果的であることが知られている。最近、我々は分子骨格内部に垂直に付加した官能基をもつお椀型の芳香族炭化水素 **1** および **2** を合成した<sup>1</sup>。本研究では、これらの分子とフラーレンとの会合挙動を検証し、垂直に付加した官能基が分子認識に与える影響を調査した。



**1** (R = OMe)

**2** (R = H)



1. Y. Tanaka, N. Fukui, H. Shinokubo, *Nat. Commun.*, **2020**, *11*, 3873.