

# 変形した筒の中での楕円形ゲスト分子の遅い固体内回転 Retarded Solid-State Rotations of an Oval-Shaped Guest in a Deformed Cylinder with CH- $\pi$ Arrays

松野太輔, 福永健悟, 佐藤宗太, 磯部寛之\*  
 東京大学大学院理学系研究科化学専攻  
 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1

Taisuke MATSUNO, Kengo FUKUNAGA, Sota SATO and Hiroyuki ISOBE\*  
 Department of Chemistry, The University of Tokyo  
 7-3-1 Hongo, Tokyo, 113-0034, Japan

## 1 はじめに

固体中における分子運動は材料の物性を左右する重要な要素である。我々は最近、筒状ホスト分子と CH- $\pi$  水素結合により会合するゲスト分子からなる超分子錯体を開発し、内部のゲスト分子が高速で回転する「分子ベアリング」となることを見出した[1]。本研究では、同じく CH- $\pi$  水素結合により会合する超分子錯体において、分子形状に手を加えることで回転速度を低下させられることを見出した[2]。

## 2 実験

筒状分子とピレンをクロロホルム/2-プロパノールの混合溶媒に溶解させ、徐々に濃縮することで超分子会合体の良質な単結晶を得た。これを KEK-PF BL-1A にて 95 K で単結晶 X 線回折実験を行い、その分子構造を明らかにした。

## 3 結果および考察

ゲストであるピレンの長軸方向の長さはやや筒状分子の直径よりも大きいため、会合により楕円形に歪んだ構造を取っていた (図 1)。固体重水素 NMR を用いてピレン分子の固体内での動的挙動を解析したところ、その速度は検出限界以下の遅いものであることが明らかになった。ホスト分子の変形によりその回転が妨げられたものと考えられる。また興味深いことに、筒状分子は固体内において二重らせんを形成する形にパッキングし、ピレンもその内部で二重らせん状に並んだ構造となっていた (図 2)。

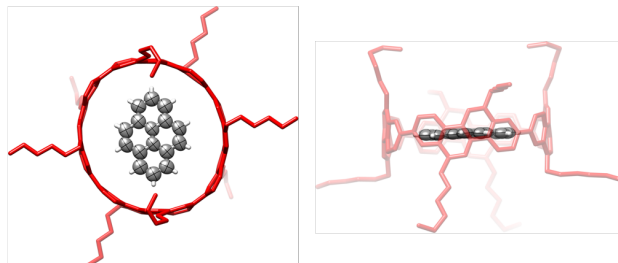


図 1. 放射光 X 線構造解析により明らかになった筒状分子とピレンからなる複合体の分子構造と Hirshfeld 表面解析の結果。CH- $\pi$  接触のある部分を色付けしている。

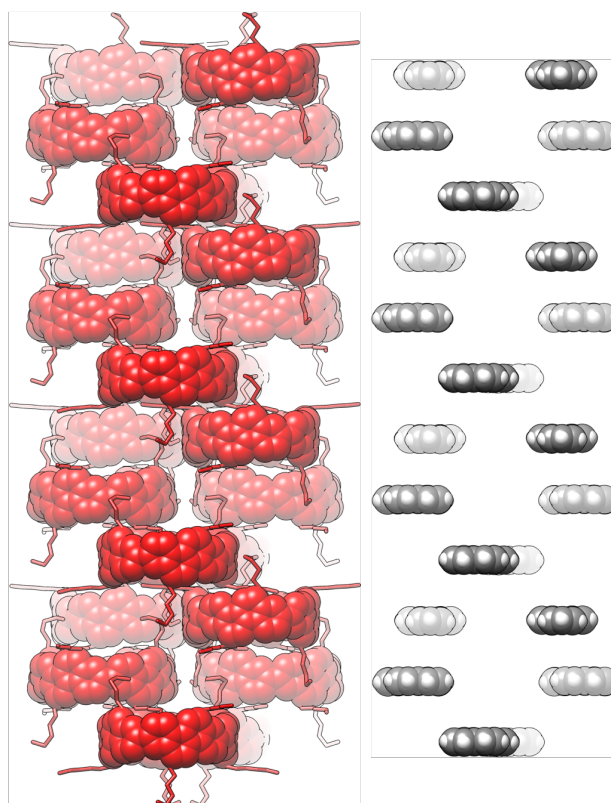


図 2. 放射光 X 線構造解析により明らかになった筒状分子とピレンからなる複合体のパッキング構造。二重らせん状に並んだ筒状分子の中でピレンが並んでいる。

## 4 まとめ

楕円形のゲスト分子を利用することで、CH- $\pi$  水素結合により形成する超分子の動的挙動を制御することに成功した。また、興味深い二重らせん状パッキング構造の構築に成功した。

## 参考文献

- [1] T. Matsuno, M. Fujita, K. Fukunaga, S. Sato and H. Isobe, *Nat. Commun.* **9**, 3779 (2018).
- [2] T. Matsuno, K. Fukunaga, S. Sato and H. Isobe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 12170 (2019).

\* isobe@chem.s.u-tokyo.ac.jp