

2023 年度年次報告書

トランススケールな理解で切り拓く革新的なマテリアル

2023 年度採択研究代表者

福永 隼也

東京大学 大学院理学系研究科

助教

ソフトなキラリティを有するナノカーボンのネットワーク構築

研究成果の概要

本研究は、ソフトなキラリティを有するかご状ナノカーボン分子を用いたネットワーク構造体の構築とその構造化学の展開を目指すものである。

本年度は、まずキラルかご状ナノカーボン分子がその内部空間にゲスト分子を取り込んで超分子錯体を形成することを見出したことから、その構造解析を進めた。その中で、超分子錯体の会合比の決定法におけるファントホッフ解析の導入の提案に至った。最近ではベイズ因子による決定法についての提案も行なっている。

また、計画の核となる「一次元ネットワーク」「二次元ネットワーク」の構築にも同時に着手をした。

「一次元ネットワーク」の戦略では、かご状ナノカーボン分子を2つ融合した分子をデザインし、7段階の合成によって目的物の単離に成功した。融合かご状分子の構造は単結晶X線構造解析により明らかにした。最小かご状分子においてこれまでに観測していたキラリティは融合かご状分子においても見られ、さらに2つのかごのキラリティが同期していることが判明した。かごの融合によるネットワーク化が引き起こしたキラル伝達の原理と性質についての検討を進めている。

「二次元ネットワーク」の戦略では、まず、かご状分子のベンゼンを部分的にピリジンに置き換えることで金属が配位できるサイトを生み出す計画となっている。本年度は、3本あるリンカーのうち1ヶ所または3ヶ所に配位サイトを有するユニット分子の合成に取り組み、おおよそ完了している。また、初期検討として、1ヶ所に配位サイトを有するユニット分子は金属原子とうまく配位でき巨大構造を構築できることが示唆された。ユニット分子の合成条件の改良と大量合成に取り組み、ネットワーク化の検討へと繋げていく予定である。

【代表的な原著論文情報】

- 1) [Fukunaga, T. M.](#), Onaka, Y. Kato, T. Ikemoto, K. Isobe, H. Stoichiometry validation of supramolecular complexes with a hydrocarbon cage host by van 't Hoff analyses, *Nature Communications*, **14**, 8246 (2023).
- 2) Onaka, Y. Sakai, R. [Fukunaga, T. M.](#) Ikemoto, K. Isobe, H. Bayesian Inference for Model Analyses of Supramolecular Complexes: A Case Study with Nanocarbon Hosts. *Angewandte Chemie International Edition*, **63**, e202405388 (2024).