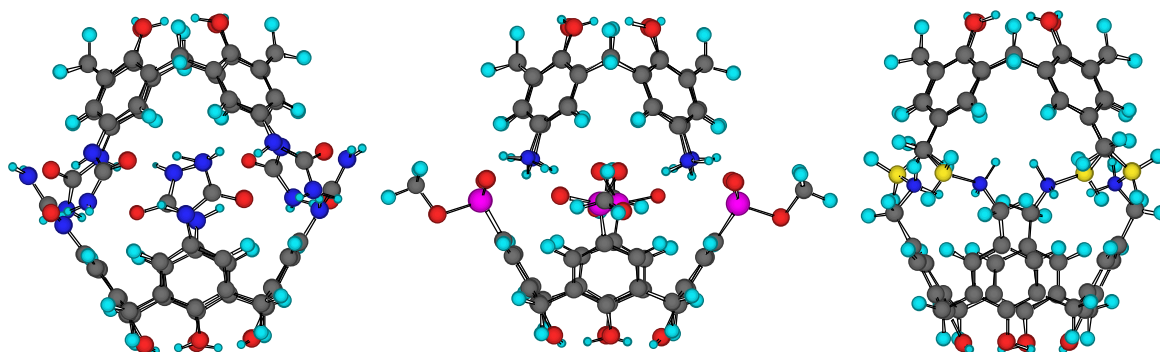


藤山亮治・折田久美

高知大学理学部物質科学科(〒780-8520 高知市曙町2丁目5-1)

【緒言】 カプセル構造を持った分子は内部に外界から完全に閉ざされた特異な空間を有しており、このような空間に閉じ込められた分子の性質は、一般的な環境の状態、すなわち溶液や固体として存在する状態と比べ劇的に変化することが知られている。このことを利用すれば、カプセル化による新機能・物性を持った分子の創生や新たな反応などが期待でき、多くの関心が持たれている。しかしながら、このようなカプセル構造を持った分子の合成は極めて煩雑であり、実用的な利用の大きな障害となっている。そこで、本研究では、計算化学によるカプセル化合物の設計という立場から、計算方法の検討を行った。

【方法】及び【結果】 カリックス[n]アレーン化合物(n=4,5)を用い、ヒドロキシ基のパラ位の置換基の相互作用によりカプセル化合物の生成を相互作用のエネルギーと幾何構造から検討した。相互作用には、尿素分子間の相互作用（水素結合）、リン酸イオンとアンモニウムイオン間の相互作用（イオン結合と水素結合）、アミンとボラン間の相互作用（配位結合）を調べた。カリックス[n]アレーン化合物(n=4,5)について、カプセル化した構造が半経験的分子軌道法AM1法によって計算できた。一方、カリックス[6]アレーン化合物については、対称的なコーン型配座は最安定化構造ではなく、ヒドロキシ基を大きな置換基に変えることが必要になってくることがわかった。今回は、AM1法によって計算されたカプセル構造（下図を参照）に基づいて、非経験的分子軌道（AM1、HF、B3LYP、ONIOM法）による最適化構造のエネルギー及び構造パラメータの違いについてカプセル化合物生成のための相互作用と関連させながら報告する。



尿素 - 尿素

リン酸イオン - アンモニウムイオン

アミン - ボラン

図1. AM1法によるカリックス[4]アレーンのカプセル化合物の最適化幾何構造