

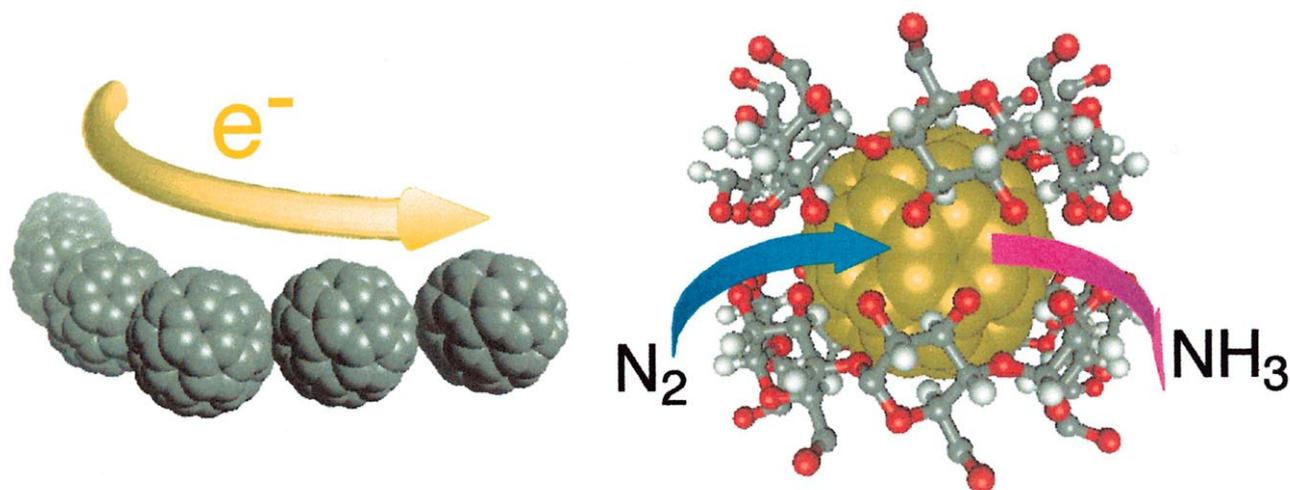
## Creation of Functionalized C<sub>60</sub> and Development of Their Novel Functions

### 官能基化C<sub>60</sub>の創製と新機能開発



プロジェクトリーダー 西郷和彦

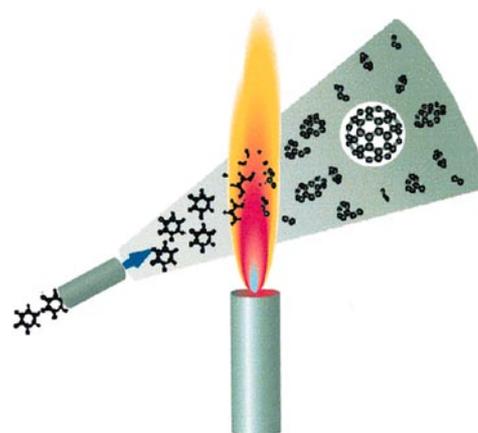
東京大学 大学院新領域創成科学研究科  
教授



#### 1. 研究の目的

C<sub>60</sub>(サッカーボール分子)は、その発見と合成がノーベル化学賞受賞の対象となった球形ナノ分子です。その独特な形状と化学的・物理的性質から、来るべき21世紀に向けて先導的且つ独創的な新世代機能材料の要素として大いに期待されています。

本プロジェクトでは、本プロジェクト参加者が見出した先駆的研究成果を基礎に、次世代人工物質として注目すべき王冠型に包接されたC<sub>60</sub>や新結合様式を有するC<sub>60</sub>ポリマーの創製とそれらの新機能開発に関する研究を集中的に行なっています。予想もされぬ大発見、大発明が相次いだC<sub>60</sub>の分野の更なる発展を期して、C<sub>60</sub>の王冠型包接、官能基化、ポリマー化、ヘテロ化等により、先導的な新現象、理論の発見に努力しています。また、それらの新機能を追究することにより、先例のない電子材料、半導体材料、超伝導材料、触媒等の創製を目指しています。



燃焼法によるC<sub>60</sub>の合成

## 2. 研究の内容

### 光学活性 $C_{60}$ の合成と機能開発

サッカーボール状の  $C_{60}$  に2つの官能基を導入する(把手を付ける)ことによってできる右手の分子と左手の分子を分けて別々に手に入れる方法を見つけました。このようにして手に入れた光学活性  $C_{60}$  は、非線型光学材料として注目されています。また、その他各種材料としての機能開発を試みています。

### $C_{60}$ 多量体の合成と機能開発

$C_{60}$  は、溶液反応ばかりでなく、固相反応でも官能基化できることを見つけました。この手法を利用して、 $C_{60}$  の二量体、三量体である  $C_{120}$ 、 $C_{180}$  を合成しています。このような  $C_{60}$  を串刺しした構造の化合物は、 $C_{60}$  とは異なった特異な性質を発揮するものと期待され、その性質の解明による機能開発に取り組んでいます。

### 選択的二官能基化 $C_{60}$ を用いる高分子合成と機能開発

$C_{60}$  の選択的二官能基化方法を開発するとともに、これらの反応を高分子合成のための原料の合成に応用しています。合成した二官能基化  $C_{60}$  化合物を利用して、 $C_{60}$  を真珠に見立てた真珠ネックレス型高分子など、 $C_{60}$  を含む高分子を合成しています。これらの高分子は、電子材料、伝導材料として期待されています。

### 王冠型 $C_{60}$ の創製と官能基化への応用

$C_{60}$  と大環状化合物(輪になった大きな分子)とから王冠型  $C_{60}$  を合成しようと試みています。このようにしてできた化合物は、まるで「土星」のような形をしており、分子として美しい姿をしています。この分子は、姿が美しいばかりでなく、 $C_{60}$  に選択的に官能基を導入するのに役立つものと期待されています。

### 遷移金属的スーパーアトム = 王冠型 $C_{60}$ の機能開発

$C_{60}$  にシクロデキストリンを加えて生成する王冠型  $C_{60}$  の機能開発を試みています。この王冠型  $C_{60}$  は、大変ユニークな性質を示し、分子状窒素からアンモニアを常温、常圧で合成する触媒となることを見つけました。まるで遷移金属のように振舞うことが分かったのです。今後の更なる機能開発が期待されています。

### 計算機化学手法による反応予測、機能予測

サッカーボール状  $C_{60}$  の独特な HOMO, LUMO (電子状態) に基づく反応の予測、生成した化合物の機能予測を計算機化学手法によって行なっています。王冠型  $C_{60}$  合成の成功は、その一つの例です。 $C_{60}$  の性質についてはまだまだ未知な点が多く、計算機化学手法は、それらを解き明かす有効な手段として期待されています。

## 3. 研究の体制

期 間：1997年6月～2002年3月

構 成：プロジェクトリーダー1名及び研究分担者5名の他に、各大学に所属する研究者、リサーチアソシエイト及び大学院生

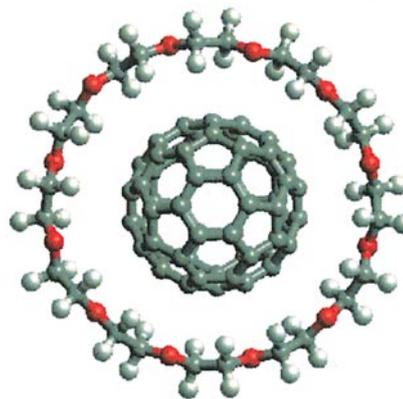
実施場所：東京大学大学院工学系研究科、群馬大学工学部、豊橋技術科学大学工学部、京都大学化学研究所、近畿大学理工学部



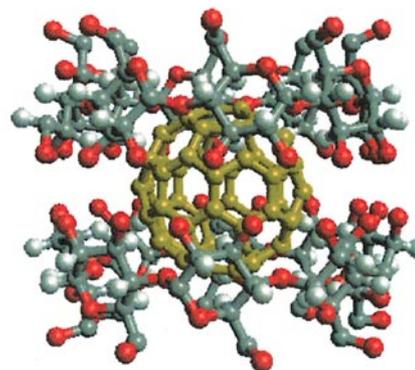
ダンベル型  $C_{60}$  二量体



二官能基化  $C_{60}$  誘導体



土星状  $C_{60}$  包接化合物



触媒として働く王冠型  $C_{60}$  包接化合物