

## 2A1b

# 超音速ジェットレーザー分光を用いた カリックスアレンの包接能力の検証

広島大学院理 西本孝太郎、本玉直哉、井口佳哉、江幡孝之

【序】包接化合物としてよく知られている calix[4]arene (C4A)を気体状態でジェット冷却して生成し、常温では形成しにくい弱い分子間力で結合した包接クラスターの形成を試み、その包接構造や包接能力を検証した。これまでの我々の研究から、C4A-Ar<sub>n</sub>ではArは図1のように付着することがわかっている。そこで本研究ではゲスト分子にN<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub>およびH<sub>2</sub>Oを選び、その包接クラスターについて検討した。

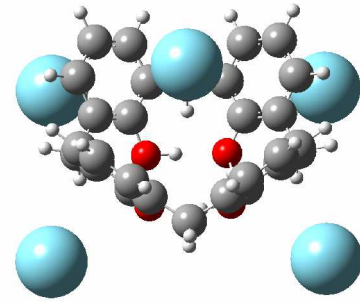


図1 calix[4]arene-Ar<sub>5</sub>

【実験】高温加熱気化したC4Aに、ゲスト分子をヘリウムガスと混合して超音速ジェットで噴出することでクラスターを生成し、レーザー誘起蛍光(LIF)スペクトルを観測した。ゲスト分子としてAr、N<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub>およびH<sub>2</sub>Oを選んだ。

【結果】図2にC4A-(N<sub>2</sub>)<sub>n</sub>とC4A-Ar<sub>n</sub>のS<sub>1</sub>-S<sub>0</sub>LIFスペクトルを示す。図中の35357cm<sup>-1</sup>(A)のバンドはC4Aの0,0バンドである。それぞれのクラスターの0,0バンドのred shiftの様子を図3に示す。red shiftの様子が非常によく似ていることから、N<sub>2</sub>クラスターにおいてもArクラスターと同様に1個目の分子は内側に、2-5個目の分子は外側に付着すると考えられる。発表では、さらに量子化学計算の結果との比較からC4A-(N<sub>2</sub>)<sub>n</sub>の包接構造について考察し、さらにC4Aの構成単位となる2,6-dimethylphenolのファンデルワールスクラスター形成をC4Aの場合と比較することでC4Aの包接能力を検証する。

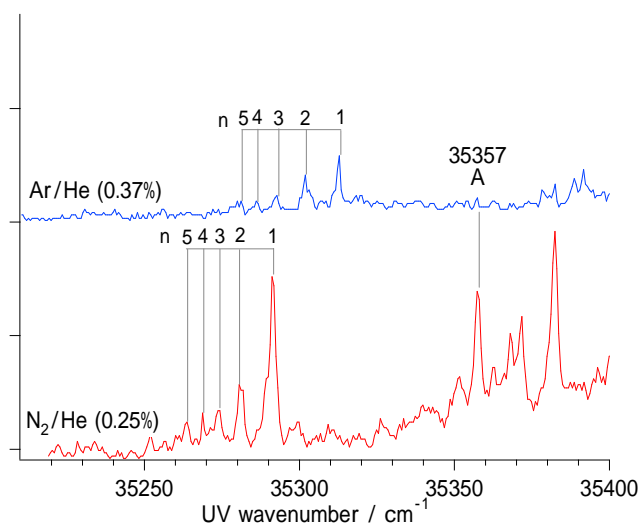


図2 C4A-(N<sub>2</sub>)<sub>n</sub>とC4A-Ar<sub>n</sub>の  
LIF スペクトル

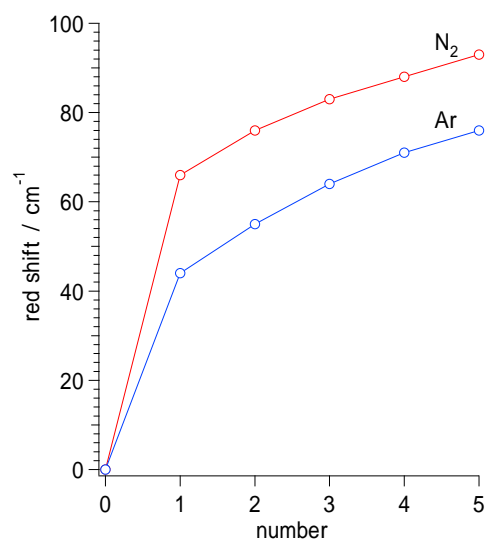


図3 LIF スペクトルの red shift