超分子グラフェンの構築を志向した環状の NHC-金属錯体の設計 と合成

(阪大理化¹・京大理化²)○川畑 壽輝¹・高橋 隼人¹²・須賀 健介¹²・齊藤 尚平¹ Design and synthesis of cyclic NHC-metal complex for construction of supramolecular graphene (¹Osaka University, ²Kyoto University) ○Kazuki Kawahata,¹ Hayato Takahashi,¹,² Kensuke Suga,¹,² Shohei Saito¹

In recent years, two-dimensional tessellation with macrocyclic molecules has attracted much attention to form supramolecular nanosheets. In particular, the attempts to obtain a specific band structure similar to graphene by 2D molecular assembly have been made, but it has not been achieved. To realize the concept of supramolecular graphene, we designed and attempted the synthesis of a cyclic NHC-metal complex fused with cyclooctatetraene (COT), which would form a 2D nanosheet through metal-metal interaction without steric hindrance.

To obtain NHC-metal complexes, a COT-fused 1,3-dibutylbenzimidazole dimer was treated with a silver salt under aqueous NaOH conditions. Characterization of the products will be discussed.

Keywords: Macrocyclic molecules; N-Heterocyclic Carbene (NHC); Metal-metal interaction; Two-dimensional tessellation; Nanosheet

近年、環状分子を集合させてナノシートを形成する研究が注目されている。中でも、平面充填された超分子に強い電子的相互作用をもたせてグラフェンと同様の特異なバンド構造を獲得する試みは従来からあるものの、実現には至っていない。本研究では、環状分子の辺同士が立体障害なく金属間相互作用によってスタッキングする分子として、シクロオクタテトラエン(COT)で縮環した環状のNHC-金属錯体を設計し、合成を試みた。1,3-dibutylbenzimidazole と COT を縮環した水溶性化合物 1 と銀塩を強塩基性条件で反応させ、ナノシートの構成要素になると期待される大環状 NHC 銀錯体の合成を試みた。

