

## 分子内コア-シェル構造を鍵とする

### 「超結合」の概念確立と機能開拓

---

代表研究者 石垣 侑祐  
北海道大学大学院 理学研究院化学部門 助教

共同研究者 鈴木 孝紀  
北海道大学大学院 理学研究院化学部門 教授

#### 研究要旨

炭素を主とする有機化学において C-C 共有結合は極めて一般的な結合である。中でも、C-C 単結合の標準結合長は 1.54 Å であり、ほぼ全ての有機化合物においてこの値を示す。一方で、最長の結合を目指した挑戦的研究も行われてきた。これまでに、国内外の研究者によって 1.7 Å を超える結合長を有する中性の有機化合物がいくつか報告されている。

そのような背景のもと、分子内コア-シェル構造に基づく分子設計戦略により、1.806(2) Å という結合長の存在を最近明らかにした。共有結合の限界ともいえるこの C-C 結合を『超結合 (hypercovalent bond)』と称し、さらなる検討を行うこととした。すなわち、本研究は、極度に伸長した共有結合がもたらす現象を解明するため、超結合領域の拡張とそれに基づく新規化学種の創出の二つを目的としている。超結合を有する化合物"群"の構築により超結合の概念確立と C-C 単結合長の世界記録更新を目指し、シェル骨格上に置換基を導入した化合物の合成を行った。

そこで、2,8 位に置換基を有するジベンゾスベレン誘導体の合成に着手し、合成ルートの確立に成功した。メトキシ体について検討を進めた結果、溶媒和した複数の擬多形結晶が得られ、X 線結晶構造解析によって 1.76~1.79 Å 程度の結合長であることを見出した。本研究により、置換基導入法を確立できたことは意義深く、電子供与/求引性置換基を導入することで、1.8 Å を超える結合の創出による超結合の概念確立と世界記録更新が期待される。

---