大きさを制御可能な内部空孔を有するキャビタンドを基にしたヘミカルセランドの合成と分子認識

（広島大院理 [1]・広島大先進理工 [2]）○原田健太郎 [1]・関谷亮 [2]・灰野岳晴 [2]

Synthesis and Molecular Recognition of a Cavitand-based Hemicarcerand bearing a size-regulable internal cavity

([1]*Graduate School of Science, Hiroshima University*, [2]*Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University*) ○Kentaro Harada,[1] Ryo Sekiya,[2] Takeharu Haino.[2]

We will present the synthesis and molecular recognition of a hemicarcerand, which is composed of covalently-linked two cavitand units. The hemicarcerand possesses a large cavity in the extended conformation, which is shrunk through the conformational change upon the copper-coordination. This conformational change was reversibly controlled by the copper complexation and decomplexation. The encapsulation of various guests within the cavities was determined by the sizes, shapes, and dimensions of the cavities. Long guests were selectively encapsulated within the extended conformation, whereas short guests were located only within the shrunk conformation. Thus, the regulable guest binding into the cavities was realized by the unique conformational changes of the hemicarcerand.

Keyword：Supramolecular Capsule; Molecular Recognition; Host-Guest Systems

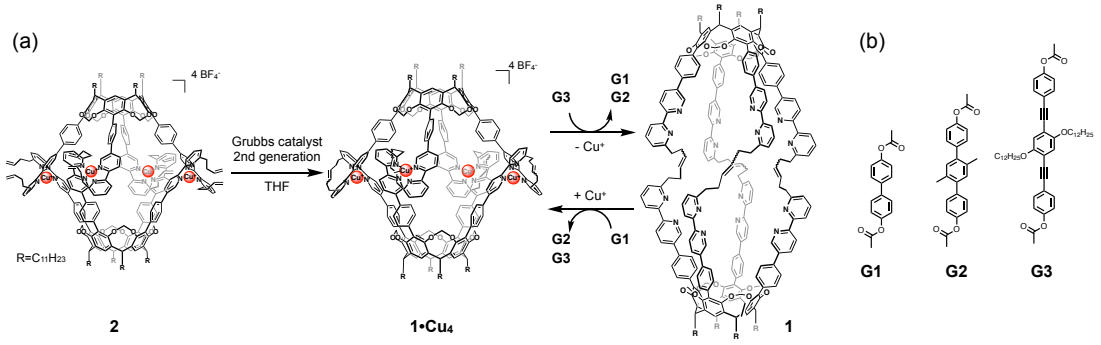

Figure 1. (a) Synthesis and molecular recognition of capsule **1** and **1•Cu$_4$**, (b) molecular structure of guest **G1-G3**.

内部に大きな空孔を有する超分子カプセルは，様々なゲストを包接する。包接するゲストの選択性はカプセルの内部空孔の大きさおよび構造に大きく依存している。よって，外部刺激によりカプセルの構造が制御できれば，複数のゲストの中から特定のゲストの捕捉と放出を制御できる超分子システムを構築が可能になる。当研究室では，二つのカリックス[4]レゾルシンアレーンキャビタンドが配位結合を介して自己集合し，超分子カプセルを形成することを報告している。発表者は，二つのキャビタンド部位をアルキル鎖で連結することで，銅イオンとビピリジンの配位の有無によってカプセルの大きさが可逆的に制御される超分子カプセル **1** を開発した。カプセルの構造制御に伴うゲストの選択的な捕捉と放出を異なる長さのゲスト **G1-G3** を用いて調べた (Fig.1)。銅イオン存在下では配位により縮んだ構造のカプセル **1•Cu$_4$** が形成され，短いゲスト **G1** を選択的に包接した。これに対して銅イオン非存在下では伸びた構造のカプセル **1** が形成され，長いゲスト **G3** が選択的に包接された。

1) Kentaro Harada, Ryo Sekiya, and Takeharu Haino, *Chem. Eur. J.*, Vol.26, Iss.26, pp5810-5917, **2020**.

© The Chemical Society of Japan