

扁球状芳香環カプセル：選択的内包と空間誘起特性

(東工大 化生研) ○岸田夏月・吉沢道人

A Spheroidal Polyaromatic Capsule: Selective Encapsulation and Cavity-Induced Properties (*Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Inst. of Tech.*) ○Natsuki Kishida, Michito Yoshizawa

Cavity functions of polyaromatic nanocapsules have attracted considerable attention. We have elucidated the wide-ranging host capabilities of *spherical* M_2L_4 polyaromatic capsules in the past decade. Here we report the host ability of a new M_2L_4 capsule with a *spheroidal* polyaromatic cavity (1.1 × 1.5 × 1.5 nm). The capsule could selectively encapsulate one molecule of various planar compounds. Competitive experiments revealed the order of the binding affinity is coronene > triphenylene > phenanthrene. In addition, the bowl-to-bowl inversion of sumanene was accelerated upon encapsulation by the spheroidal cavity.

Keywords: *Molecular capsule; Spheroidal cavity; Molecule encapsulation; Intermolecular interaction; Planar molecule*

芳香環からなるナノカプセルの空間機能が注目されている。私達はこれまでの10年間に、球状の M_2L_4 型芳香環カプセルの高い分子内包能を解明してきた (*Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 2392)。今回、扁球状の M_2L_4 型芳香環カプセル **1** (Kishida *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 9599) の選択的内包と空間誘起特性を明らかにしたので報告する。

オルトフェニレンを有するビスピリジン配位子と Pd(II)イオンからなる芳香環カプセル **1** は、内部に 1.1 × 1.5 × 1.5 nm の扁球状空間を有することを、トリフェニレン内包体 **1**·**Tri** の結晶構造解析により明らかにした (下図)。カプセル **1** は様々な平面状分子を1分子内包し、競争実験からその優先順位は、コロンン > **Tri** > ピレン > フェナントレン > アントラセンであった。この選択性は空間内での多点 CH- π 相互作用に起因する。また、スマネン (**Sum**) を内包することで、扁球状骨格による反転運動の加速挙動が観測された。

