芳香環カプセル化による不安定分子の性質改変

（東工大 化生研）○湯浅茉奈・角田瑠輝・吉沢道人

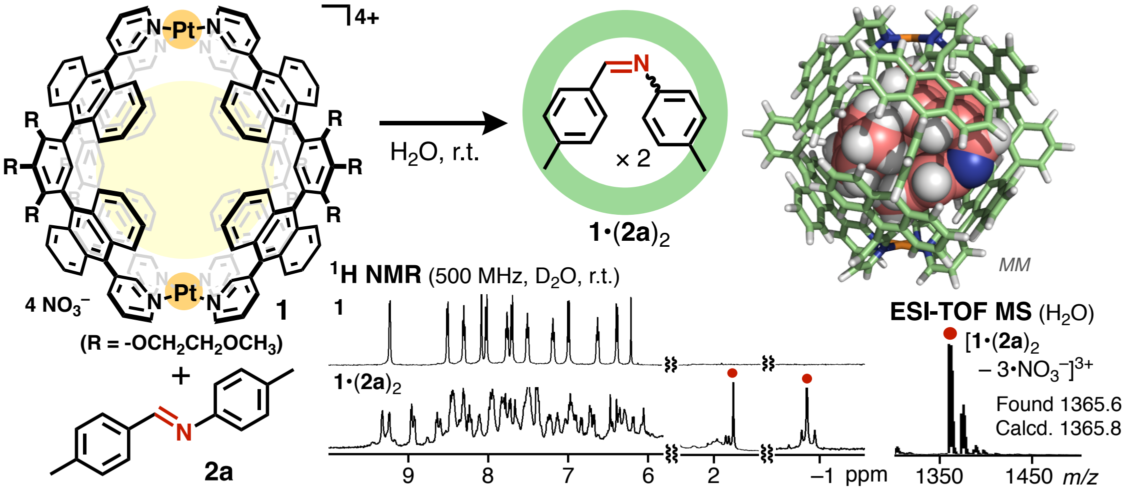
Reactivity Alteration of Unstable Molecules upon Polyaromatic Encapsulation (*Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Inst. of Tech.*) ○Mana Yuasa, Ryuki Sumida, Michito Yoshizawa

Imine compounds provide easily hydrolyzable C=N bonds in bulk aqueous solution. In particular, *C,N*-diaryl imines adopt a relatively stable *trans* form under ambient conditions. Here we report that a polyaromatic capsule selectively encapsulates two molecules of imines with various aryl groups in water at room temperature. The resultant host-guest structures were confirmed by NMR and MS analyses. Notably, the hydrolysis rates of the encapsulated imines were significantly decreased and altered by changing the substituents on the aryl groups.

Keywords: Molecular capsule, Encapsulation, Unstable molecule, Stabilization

イミン化合物は、水中で容易に加水分解される C=N 結合を持つ。特に、*C,N*-ジアリールイミンは、通常の条件下では安定な *trans* 体を取ることが知られている。今回、配位結合性の芳香環カプセル **1**（*J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 11438）を用いることで、２分子のイミンを効率良く内包すると共に、カプセル化による水中での加水分解の抑制に成功した。

水中・室温で、２つの *p*-トリル基を有するイミン **2a** とカプセル **1** を 30 分間混合したところ、２分子内包体 **1**•(**2a**)$_2$ が選択的に生成することを ^{1}H NMR および ESI-TOF MS 解析で明らかにした（下図）。特徴的に、内包された **2a** のメチル基に由来するシグナルは高磁場シフトして、1.78 と–0.85 ppm に観測され、内包体に由来する分子イオンピークが *m/z* = 1365.6 に観測された。分子力場計算による解析から、**1** の球状空間に *cis* 体の **2a** が適合することが示された。また、経時変化を NMR で追跡した結果、**2a** は内包により加水分解速度が約 5 倍以上も抑制されることが明らかになった。さらに、*p*-トリル基とフェニル基を有するイミン **2b** も同様の条件で内包され、**1**•(**2a**)$_2$ よりも速やかに加水分解された。



© The Chemical Society of Japan