

パーフルオロシクロパラフェニレンのホスト-ゲスト化学

(名大院理¹・名大 WPI-ITbM²) ○井本 大貴¹・周戸 大季¹・八木 亜樹子^{1,2}・伊丹 健一郎^{1,2}

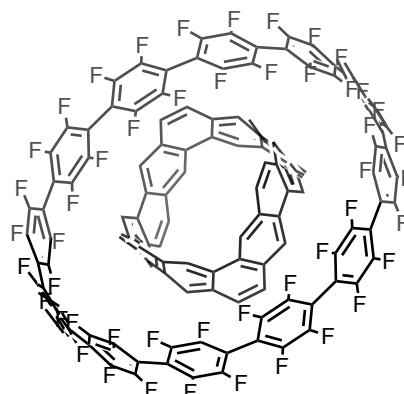
Host-guest Chemistry of Perfluorocycloparaphenylenes (¹*Graduate School of Science, Nagoya University*, ²*Institute of Transformative Bio-Molecules (WPI-ITbM), Nagoya University*) ○ Daiki Imoto,¹ Hiroki Shudo,¹ Akiko Yagi,^{1,2} Kenichiro Itami^{1,2}

Cycloparaphenylene (CPP) is a molecule in which the benzene rings are cyclically linked at the *para* position. In 2021, we achieved the synthesis of perfluorocPPs (PF[*n*]CPPs, *n* = 10, 12, 14, 16) with all the hydrogen atoms of CPP being replaced by fluorine atoms.¹ Host-guest chemistry of PFCPPs by utilizing their high electron affinity is of great interest. Herein, we report the first synthesis of PF[12]CPP⊃(6,6)carbon nanobelt ((6,6)CNB). (6,6)CNB is a rigid tubular aromatic hydrocarbon which was synthesized by our group in 2017.² When the ¹H NMR spectrum of the mixed solution of (6,6)CNB and PF[12]CPP in chloroform-*d* was measured, the spectrum indicating the interaction between (6,6)CNB and PF[12]CPP was obtained. The X-ray crystallography has also revealed the structure of PF[12]CPP⊃(6,6)CNB, which strongly shows the host-guest interaction between (6,6)CNB and PF[12]CPP.

Keywords: Host-Guest, Cycloparaphenylene, Perfluoro compounds

シクロパラフェニレン(CPP)はベンゼン環がパラ位で環状に繋がった分子である。我々は2021年、CPPの水素原子が全てフッ素原子に置換された構造をもつパーフルオロCPP(PFCPP)の合成に成功した¹⁾。これまでに、テトラフルオロフェニレンユニットを10個、12個、14個および16個もつPF[*n*]CPP(*n* = 10, 12, 14, 16)がそれぞれ得られている。PFCPPはCPPに比べて高い電子親和性をもつと考えられ、PFCPPの環内部の空間を用いた研究展開に興味をもたれている。

本研究ではPFCPPのホスト-ゲスト化学を開拓すべく、PF[12]CPPを用いた包接分子の合成を行った。(6,6)カーボンナノベルト((6,6)CNB)は剛直な筒状芳香族炭化水素である²⁾。(6,6)CNBおよび1当量のPF[12]CPPを重クロロホルム中40 °Cで混合し、混合溶液の¹H NMRスペクトルを測定した。結果、その¹H NMRシグナルは(6,6)CNBの重クロロホルム溶液のものに比べて高磁場側に観測された。混合溶液から単結晶が得られたためX線結晶構造解析を行ったところ、(6,6)CNBがPF[12]CPPに内包された分子(PF[12]CPP⊃(6,6)CNB)の構造を確認することができた。発表では、PF[12]CPP⊃(6,6)CNBの性質についても議論する。



PF[12]CPP ⊃ (6,6)CNB

- 1) Shudo, H.; Kuwayama, M.; Shimasaki, M.; Nishihara, T.; Takeda, Y.; Kuwabara, T.; Yagi, A.; Segawa, Y.; Itami, K. *ChemRxiv* **2021**, DOI: 10.33774/chemrxiv-2021-7kd63
- 2) Povie, G.; Segawa, Y.; Nishihara, T.; Miyauchi, Y.; Itami, K. *Science* **2017**, 356, 172.