

フェロセンカプセルによる内包誘起電荷移動相互作用

(東工大 化生研) ○遠山和希・田中裕也・吉沢道人

Encapsulation-induced Charge-transfer Interactions by a Ferrocene-based Capsule
(Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech) ○Kazuki Toyama, Yuya Tanaka, Michito Yoshizawa

A ferrocene-based micellar capsule is formed in water from bent amphiphilies with two ferrocene units. Here we report unusual charge-transfer interactions upon the encapsulation of electron accepting molecules. The micellar capsule efficiently incorporated TCNQ in water through a grinding protocol. The product structure was revealed by UV-visible-NIR, DLS, and molecular modeling studies. Notably, the UV-visible-NIR spectrum showed a broad absorption band in the NIR region, which is undetected without the encapsulation, derived from host-guest charge-transfer interactions. Similar interactions were observed upon encapsulation of chloranil.

Keywords: Ferrocene, Electron acceptor molecule, Micellar capsule, Molecular encapsulation, Charge-transfer interaction

疎水基に芳香環や脂肪族骨格を導入したV型両親媒性分子は、水中・室温で定量的にミセル型カプセルを形成する (*Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 2392–2404)。また、有機金属骨格のフェロセンを有するV型両親媒性分子 **FA** から同様なカプセル (**FA**)_n が得られる。今回、電子受容性分子を内包した (**FA**)_n が、特異的に電荷移動相互作用を発現したので報告する。

グラインディング法により、フェロセンカプセル (**FA**)_n は電子受容性の **TCNQ** を水中で効率良く内包した (下図上)。内包体 (**FA**)_n·(**TCNQ**)_m の構造は、UV-visible-NIR、DLS および分子モデリングで解明した。注目すべきことに、**TCNQ** を内包した場合に、ホスト-ゲスト間での電荷移動相互作用に由来するブロードな吸収帯が近赤外領域 (500~1300 nm) に観測された (下図下)。同様な電荷移動相互作用は、(**FA**)_n がクロラニル (**Chl**) を内包した場合にも観測された。

