

大環状イミンの自己組織化における擬ラセミ分子の配列制御

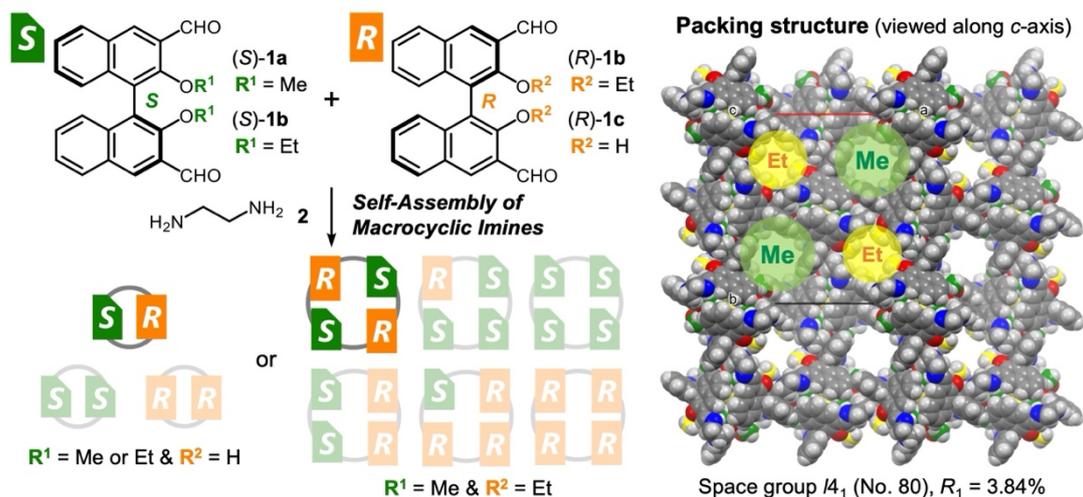
(横浜国大院理工¹・JST さきがけ²) ○木本 百花¹・杉山 翔一¹・伊藤 傑^{1,2}
 Controlled Arrangement of Quasi-Racemic Molecules in Self-Assembly of Macrocyclic Imines (¹Graduate School of Engineering Science, YOKOHAMA National University, ²PRESTO, JST) ○Momoka Kimoto,¹ Shoichi Sugiyama,¹ Suguru Ito^{1,2}

Self-assembly using dynamic covalent bonds is an excellent method for the facile preparation of macrocyclic molecules. However, it is difficult to arrange two components with different partial structures in the same molecule. Self-assembly of macrocyclic boronic esters incorporating "quasi-racemic" diboronic acids, which have different substituents in both enantiomers, was achieved by taking advantage of the complementarity in arranging enantiomers. In this study, self-assembly of macrocyclic imines incorporating two pairs of quasi-racemic dialdehydes has been achieved. Notably, porous imine crystals forming two types of one-dimensional channels surrounded by different alkyl groups were obtained.

Keywords : Dynamic Covalent Bond; Self-Assembly; Macrocyclic Compound; Quasi-Racemic Molecule; Organic Crystal

動的共有結合を利用した超分子化合物の自己組織化では、部分構造の異なる構成成分を同一の構造体中に配列することは難しい。エナンチオマー同士の部分構造が異なる「擬ラセミ体」のジボロン酸を用いることで、両エナンチオマーが組み込まれた大環状ボロン酸エステルが得られている¹⁾。今回、動的イミン結合を利用して、擬ラセミ体のジアルデヒドを組み込んだ大環状イミンの自己組織化を実現した。

メチル基またはエチル基をもつ(S)-**1a** または(S)-**1b** と、ヒドロキシ基をもつ(R)-**1c** をエチレンジアミン(**2**)と混合すると、擬ラセミ体の両エナンチオマーが1分子ずつ組み込まれた大環状イミンが選択的に得られた。メチル基をもつ(S)-**1a** とエチル基をもつ(R)-**1b** の組み合わせでは、両者が2分子ずつと4分子の**2** からなる単一の大環状イミンが結晶性沈殿として析出した。再結晶後に得た単結晶のX線構造解析の結果、メチル基またはエチル基に囲まれた2種類の一次元細孔をもつことが分かった。



1) S. Ito, K. Ono, N. Iwasawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 13962.