水溶性の芳香環ピンセットの構築と性質

（東工大 化生研）○岸田夏月・吉沢道人

Synthesis and Properties of Water-Soluble Polyaromatic Tweezers

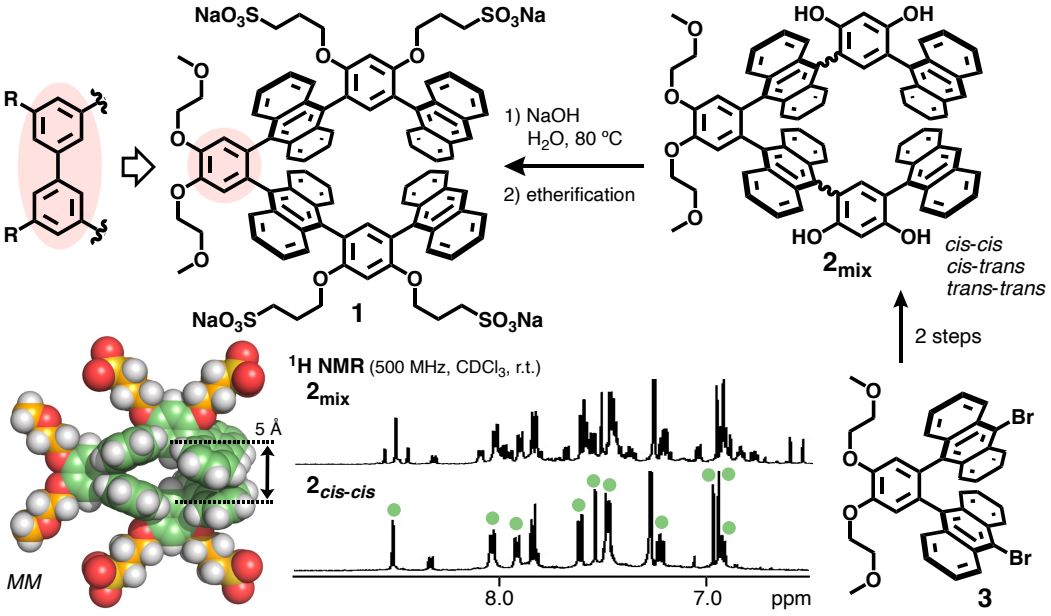
(*Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech*) ○Natsuki Kishida, Michito Yoshizawa

Polyaromatic tweezers bearing four anthracene panels display wide-ranging binding abilities toward organic dyes in water. Here we report the synthesis and properties of novel polyaromatic tweezers with narrower binding sites, by using an *ortho*-phenylene hinge. Thermal isomerization of the precursor with three conformations in basic aqueous solution gave rise to a C-shaped isomer with 100% selectivity. Its external functionalization led to the selective formation of the water-soluble polyaromatic tweezers. The NMR, MS, and molecular modeling studies revealed its C-shaped structure with a narrow cavity sandwiched by polyaromatic frameworks.

Keywords: molecular tweezers, anthracene, thermal isomerization, water

４つのアントラセン環を有する芳香環ピンセットは、水中で色素分子に対する幅広い捕捉能を有する（*Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 3570）。今回、この芳香環ピンセットの架橋部位にオルトフェニレンを導入することで、より狭い結合部を有する新規な分子ピンセット **1**（下図左上）を開発した。

前駆体である OH 体 **2** はアントラセン二量体 **3** から２ステップで合成し、３つの回転異性体からなる混合物 $\mathbf{2}_{mix}$（下図右上）として得た。これを塩基性水溶液中で加熱攪拌することで異性化し、疎水効果を駆動力として C 型異性体 $\mathbf{2}_{cis\text{-}cis}$ が 100%の選択性で得られた。最後に、親水基を導入することで目的の水溶性芳香環ピンセット **1** を得た。生成物の構造は、NMR および MS 測定、分子力場計算から、４つのアントラセン環に挟まれた 5 Å以下の狭い空間を有することが明らかになった（下図左下）。



© The Chemical Society of Japan