

キノリン/インドール環状4量体 (Q₂In₂) のデザイン・合成および物性評価

(慶大院薬¹、微化研²) ○木原 和輝¹・木村 美玲¹・Wei Xu¹・熊谷 直哉^{1,2}

Design, Synthesis of Quinoline/Indole Cyclic Tetramer (Q₂In₂) and Their Physicochemical Properties (¹Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Keio University, ²Institute of Microbial Chemistry) ○Kazuki Kihara,¹Mirei Kimura¹, Wei Xu,¹ Naoya Kumagai^{1,2}

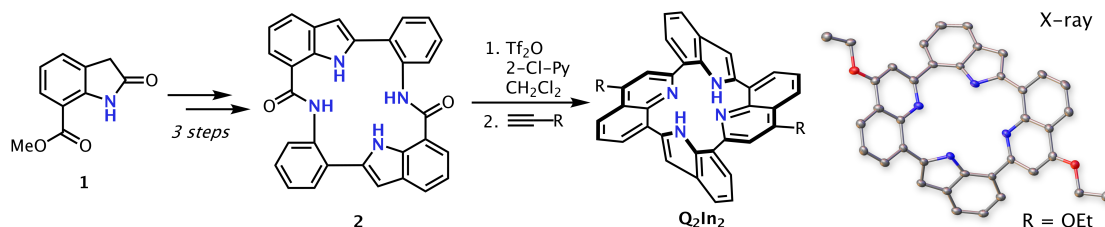
Based on our recent study on a quinoline tetramer, TetraQuinoline (TEQ),¹ we designed a new macrocyclic molecule Q₂In₂ comprising of two quinoline (Q) and two indole (In) units, as a molecule with two NH moieties similar to porphyrins with non-flat saddle shape. Macrocyclic diamide **2** was synthesized as a key precursor in high yields via a three-step sequence of bromination of oxindole **1** by POBr₃, installation of an aniline unit at the 2-position by Suzuki-Miyaura coupling, followed by dimerization under basic conditions. After converting the anilide of **2** to iminotriflate, Q₂In₂ derivatives having R-substituent on the quinoline ring were synthesized by quinoline formation with various alkynes. These derivatives exhibited a substituent-dependent fluorescence maximum at 462–527 nm. The metal complexes of Q₂In₂ will also be discussed in detail.

Keywords : Macrocyclic molecule; Quinoline; Indole; Metal complex

最近我々は、立体型ポルフィリンとしてキノリン4分子を head-to-tail で連結した分子 TEtraQuinoline (TEQ) を合成し、その機能探索研究を行った¹。同系のサドル形状を有し、ポルフィリンと同様に2つのNH部位を有する分子として、キノリン(Q)2分子とインドール(In)2分子を対角に有する新分子 Q₂In₂ をデザインした。

7位にアルコキシカルボニル基を有するオキシインドール**1**を出発原料とし、POBr₃による2-ブロモインドールへの誘導、鈴木・宮浦カップリングによる2位へのアニリンユニット導入、続く塩基性条件による大環状ジアミド化により、いずれも高収率の3ステップにて**2**を合成した。**2**のアニリド部位をイミノトリフレートに変換後、各種アルキンとのキノリン形成により、任意のR置換基をキノリン環上に有するQ₂In₂誘導体を合成した。各種誘導体は置換基依存的に462–527 nmの蛍光極大を示した。

発表では、Q₂In₂の金属錯体も併せて詳細を報告する。



1. Xu, W.; Nagata, Y.; Kumagai, N. *J. Am. Chem. Soc.* in press.