

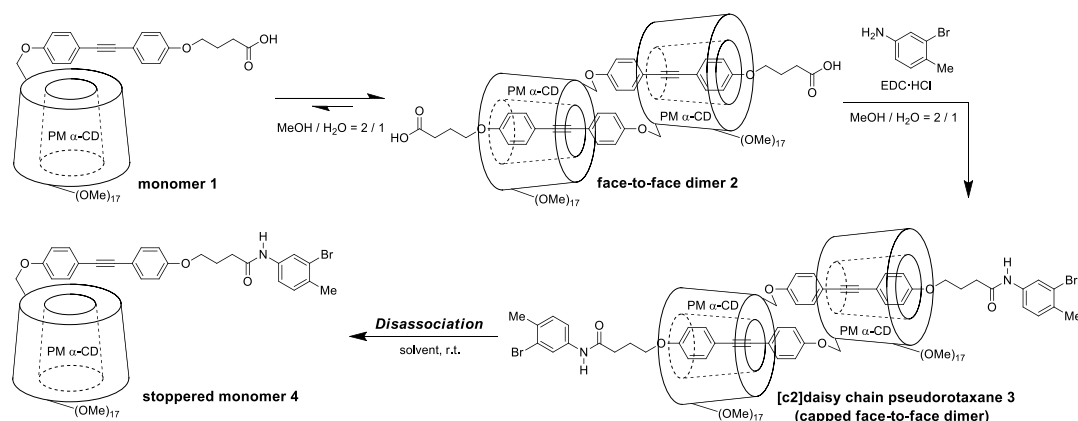
ゲスト分子連結メチル化シクロデキストリンを用いた単離可能な [c2]daisy chain 擬ロタキサンの合成

(大阪歯科大¹・関西大²) ○津田 進¹・吉野 未来²・藤原 眞一¹・西山 豊²
 Synthesis of an Isolatable [c2]Daisy Chain Pseudorotaxane Based on Permethylated α -Cyclodextrin Bearing a Guest Molecule (¹Osaka Dental University, ²Kansai University)
 ○Susumu Tsuda,¹ Miku Yoshino,² Shin-ichi Fujiwara,¹ Yutaka Nishiyama²

A permethylated α -cyclodextrin derivative (monomer **1**) linked a guest molecule bearing a terminal carboxy group was associated to form face-to-face dimer **2** in methanol/water (2/1), and the obtained dimer **2** was capped with 3-bromo-4-methylaniline and EDC condensation reagent. The capped face-to-face dimer **3** was easily isolated by the same method¹ previously used to isolate a [c2]daisy chain rotaxane. ¹H NMR measurements revealed that face-to-face dimer **3** was stable and hardly disassociated to the corresponding stoppered monomer **4** in THF-*d*₈, while face-to-face dimer **3** was rapidly decomposed to stoppered monomer **4** in chloroform-*d*. These results indicate that the capped face-to-face dimer **3** is an isolatable [c2]daisy chain pseudorotaxane.

Keywords : Pseudorotaxane; Permethylated Cyclodextrin; Diarylacetylene

メタノール/水(2/1)混合溶媒中、末端カルボキシ基を有するゲスト分子が連結した完全メチル化 α -シクロデキストリン(monomer **1**)から face-to-face dimer **2** を形成させ、3-ブロモ-4-メチルアニリン、EDC 縮合剤を用いてキャッピングした。キャッピングされた face-to-face dimer **3** は、以前に[c2]daisy chain ロタキサンを単離する際に用いた方法¹⁾によって簡便に単離された。¹H NMR 測定から、重 THF 中で face-to-face dimer **3** は安定に存在し、ほぼ stoppered monomer **4** に解離しないことが確認された。一方で、重クロロホルム中では、face-to-face dimer **3** は stoppered monomer **4** へ速やかに解離することが示された。以上の結果から、キャッピングされた face-to-face dimer **3** は単離可能な[c2]daisy chain 擬ロタキサンであることが明らかとなった。



1) Tsuda, S.; Komai, Y.; Fujiwara, S.; Nishiyama, Y. *Chem. Eur. J.* **2021**, 27, 1966–1969.