

環状イミド化合物のハロアルカン包接結晶作製と単結晶X線構造解析

(昭和薬大¹・徳島文理大香川薬²) ○川幡 正俊¹・近藤 沙菜²・富永 昌英²・兵頭 直²・山口 健太郎²

Preparation and single crystal X-ray structural analysis of inclusion crystals of imide-based macrocycles with haloalkanes (¹Showa Pharmaceutical University, ²Faculty of Pharmaceutical Sciences at Kagawa Campus, Tokushima Bunri University) ○Masatoshi Kawahata,¹ Sana Kondo,² Masahide Tominaga,² Tadashi Hyodo,² Kentaro Yamaguchi²

Three diimide-based macrocycles containing adamantane units were employed as the hosts to create inclusion crystals containing several liquid halocarbons. In crystal **1a**, reactive iodomethane was encapsulated within the cavity of **1**, where C–I··· π contacts between iodine atoms and pyromellitic diimide units was observed. Crystals **2a** with bromoform or **3a** with chloroform were formed by macrocycles possessing naphthalenediimide parts or oxydiphthalimide units. Trihalomethanes were captured in the macrocycles through C–X··· π contacts in addition to other non-covalent interactions.

Keywords : Crystal Structure Analysis; Organic Crystals; Trihalomethanes

ピロメリット酸無水物などとアミノメチル基をもつ二置換アダマンタンから環状イミド分子を合成し、これらをハロアルカン(ヨードメタン、ブromoホルム、クロロホルム)共存下、結晶化を試みたところ、ハロアルカン包接結晶が得られた。結晶 **1a** において、ヨウ素原子とピロメリットジイミド部との間に C–I··· π 相互作用が確認され、ヨードメタンは **1** のキャビティー内に取り込まれていた。ブromoホルムを取り込んだ結晶 **2a**、クロロホルムを取り込んだ結晶 **3a** でも同様に **2** あるいは **3** のキャビティー内にトリハロメタンが取り込まれ、C–X··· π 相互作用などが確認された。

