

共有結合性の芳香環ボウル：異性体合成と分子内包能

(東工大 化生研) ○青木達哉・岸田夏月・吉沢道人

Covalent Polyaromatic Bowls: Isomer Synthesis and Host Functions (*Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech*) ○Tatsuya Aoki, Natsuki Kishida, Michito Yoshizawa

Bowl-shaped compounds are expected to have a wide range of host abilities due to the open cavities. Here we report the synthesis and host properties of covalent polyaromatic bowls bearing four anthracene rings. A new *ortho*-bowl was synthesized from *ortho*-substituted bispyridine ligands and diiodomethane. The structure was confirmed by NMR and MS analyses. The *ortho*-bowl showed host abilities toward Cu(II)-phthalocyanine in aqueous solution. The host function was compared with that of a bowl isomer bearing *meta*-substituted bispyridine ligands.

Keywords: Polyaromatic bowl, Anthracene, Host function, Isomer

開口空間を持つボウル型分子は、幅広い分子内包能が期待できる。今回、4つのアントラセン環を有するオルトフェニレン架橋の芳香環ボウル **o-1** を新規に構築し、既報のメタ架橋の芳香環ボウル **m-1** (K. Yazaki, M. Yoshizawa *et al.*, *Chem. Commun.*, **2013**, 49, 1630–1632) と共にその内包能を明らかにした。

まず、ボウル **o-1** はビスピリジン配位子 **2** とジヨードメタンの S_N2 反応と、続くイオン交換によって合成した (24%、下図左上)。その構造は NMR と ESI-TOF MS 解析で明らかにした。¹H NMR スペクトルでは、**o-1** の形成によるピリジンシグナルの低磁場シフトとシグナル数の減少が見られ、対称性の高い構造の生成が示唆された (下図左下)。最適化構造では、開口空間を持つボウル型構造が示された (下図右上)。次に、**o-1** と銅フタロシアニン **CuPc** を水/メタノール混合溶液中で攪拌することで、緑色の溶液を得た。UV-visible スペクトルにおいて 520~770 nm に新たなピークが観測され、**CuPc** の内包を達成した。さらに、その内包効率はボウル **m-1** に対して約 3 倍高いことが明らかになった (下図右下)。

