

芳香環ケージによる嵩高い色素分子の捕捉と色調変化

(東工大 化生研) ○上田真祐子・岸田夏月・Lorenzo Catti・吉沢道人

Incorporation and Spectroscopic Modulation of Bulky Dyes by a Polyaromatic Cage
(Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech) ○Mayuko Ueda, Natsuki Kishida, Lorenzo Catti, Michito Yoshizawa

The majority of coordination capsules with well-defined cavities provide no host ability toward bulky molecules. Here we report that a polyaromatic cage can bind bulky dyes with a coumarin, perylene bisimide, or porphyrin framework in aqueous solution. The solubility and spectroscopic properties of these dyes were facily altered upon incorporation. Notably, the emissivity of coumarin derivatives was changed depending on the substituent upon incorporation. The color of perylene bisimide derivatives was remarkably changed from yellow to red upon incorporation.

Keywords: Polyaromatic cage, Bulky dye, Incorporation, Perylene bisimide, Porphyrin

限定された内部空間を持つ配位結合性カプセルは通常、嵩高い分子を捕捉できない。今回、アントラセン環を有する芳香環ケージ (*Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 4200) に長鎖親水基を導入した誘導体 **1** (下図左) が、水系溶媒中で嵩高い色素分子を捕捉し、その分光学的性質を変化させられることを明らかにした。

まず、ベンゾチアゾール基を有する嵩高いクマリン色素 **2a** とケージ **1** を水系溶媒中で加熱攪拌することで、1 分子内包体 **1·2a** を得た。**1·2a** は高い蛍光量子収率 ($\phi_F = 62\%$; 下図中央) を示した。一方、単独で同程度の蛍光性を示すベンゾイミダゾール誘導体 **2b** は内包により消光 ($\phi_F = 38\%$) した。次に、嵩高いペリレンビスイミド **3** と **1** を水系溶媒中で超音波照射することで、内包体 **1·3** を得た。内包により **3** の色が黄から赤へ顕著な変化を示し、内包された **3** に由来する吸収帯がブロードニングして観測された (下図右)。さらに同様の方法で、嵩高いポルフィリン **4** の 1 分子内包が、UV-visible と DLS 測定から示唆された。計算構造からは、**4** のコア部分が **1** の中心部に位置し、嵩高い置換基が開口部に位置する構造が示唆された。

