

扁球状芳香環カプセル：平面金属錯体の内包とその電子状態変化

(東工大 化生研) ○岸田夏月・吉沢道人

Electronic Properties of Planar Metal-Complexes within a Spheroidal Polyaromatic Capsule (*Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech*) ○Natsuki Kishida, Michito Yoshizawa

Physical properties in polyaromatic spaces have received much attention. Our coordination capsule with a spheroidal polyaromatic cavity encapsulates one molecule of planar and bowl-shaped compounds through multiple CH- π interactions. Here we report the host ability of the capsule toward planar metal-complexes. The capsule could quantitatively encapsulate one molecule of Pd(II)- and Cu(II)-acetylacetonates. ESR analysis revealed that the peaks of the latter host-guest complex are different from those of the Cu(II)-complex in the solid state, indicating an efficient capsule-based isolation effect.

Keywords: molecular capsule, spheroidal cavity, encapsulation, metal complex, ESR

芳香環に囲まれた空間では、通常の溶液や固体中とは異なる性質が期待できる。扁球状の内部空間を有する芳香環カプセル **1** は、CH- π 相互作用を鍵として平面状やボウル状の化合物を 1 分子で内包できる (*J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 9599)。今回、この芳香環空間への平面金属錯体の内包とその電子状態を明らかにした。

まず、カプセル **1** とパラジウム(II)-アセチルアセトン **2a** (M = Pd) を水系溶液中で加熱攪拌することで、1 分子内包体 **1·2a** が定量的に生成することを ^1H NMR および ESI-TOF MS 測定で明らかにした (下図)。次に、同様の手順で銅(II)錯体 **2b** (M = Cu) の 1 分子内包体 **1·2b** を得た。室温・固体状態での **1·2b** の ESR スペクトルにおいて、超微細分裂したシグナルが観測されるのに対して、単独の **2b** の固体は顕著にブロードなシグナルを与えた (下図右下)。このことから、カプセル **1** は効果的に **2b** を孤立化していると考えられる。

