フッ素置換ニッケル錯体を用いた芳香族ゲスト包接及び蒸気吸脱着

（芝浦工大院理工）○臼井大智・石田裕己・羽深佑亮・堀　顕子

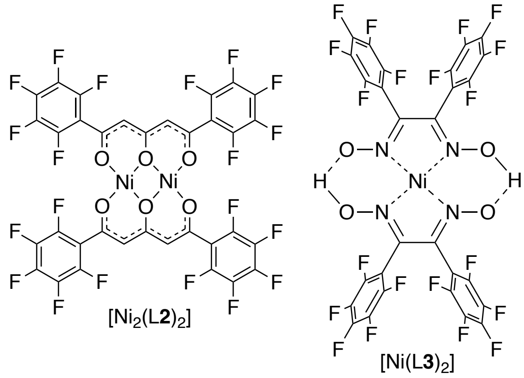
Guest encapsulation and vapor adsorption/desorption of fluorine-substituted Nickel complexes

(*Graduate School of Engineering and science, Shibaura Institute of Technology*) ○Hirotomo Usui, Yuki Ishida, Yusuke Habuka, Akiko Hori

The efficient guest recognition for non-polar molecular crystals is needed to understand the weak intermolecular interactions and their selectivity. The metal complexes with fluoroaromatic substituted ligands can recognize various small molecules through quadrupole moments. In this study, we have prepared mono and dinuclear nickel complexes with the fluorine-substituted ligands and investigated the co-crystallization and encapsulation phenomena with aromatic guest compounds, *e.g.*, benzene and hexafluorobenzene. The crystals were characterized by crystallographic studies and further investigated by vapor adsorption/desorption studies.

Keywords : quadrupole moment; metal complex; molecular recognition

近年、無極性分子への効率的な分子認識法の開発が求められている。フッ素は芳香族化合物の構造を大きく変えることなく、分子認識性能を劇的に変化させることが期待できる置換基である。当研究室では芳香族フッ素置換基を導入した金属錯体が負の四重極モーメントをもつさまざまな小分子を認識することを明らかにしている[1)]。本研究ではフッ素置換配位子を用いた単核および二核ニッケル錯体を合成し（図 1)、ベンゼンやヘキサフルオロベンゼンを含む芳香族化合物との共結晶化や包接現象を調べた。Ni^{2+}イオンは、4 配位平面四角形と 6 配位八面体形の両方の構造を安定して取ることができるため、分子認識に重要な役割を果たしている。ゲストを取り込んだ金属錯体の結晶構造は単結晶 X 線構造解析から明らかにした。[Ni(**L3**)$_2$]についてベンゼン及びヘキサフルオロベンゼン蒸気を用いた蒸気吸脱着測定を行った（図 2)。ベンゼンでは約 2 分子の保持を示すヒステリシスループが見られたが、ヘキサフルオロベンゼンでは低圧側に行くにつれ保持しないことから、ベンゼンとの相互作用が強く働くことがわかった。当日は他の芳香族分子の分子認識特性についても議論する。



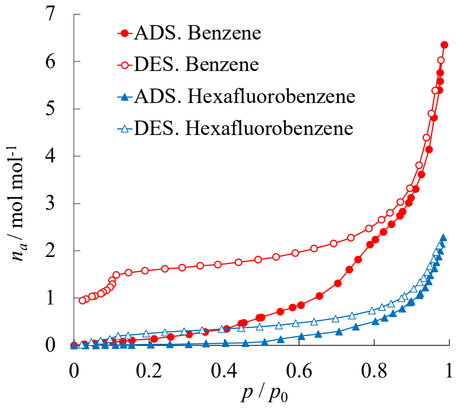


図1. [Ni$_2$(**L2**)$_2$]及び[Ni(**L3**)$_2$]の分子構造　　図2. [Ni(**L3**)$_2$]の蒸気吸脱着等温線

1) Y. Ikumura *et al., Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 5051-5060.

© The Chemical Society of Japan