

新規フェニル置換 π 拡張環状チオフエン 6 量体の合成と炭化水素の取り込み現象

(横国大院環境情報¹・名市大院²・都立大院理³) ○渡部 裕太¹・大谷 裕之¹・青柳 忍²・伊與田 正彦³

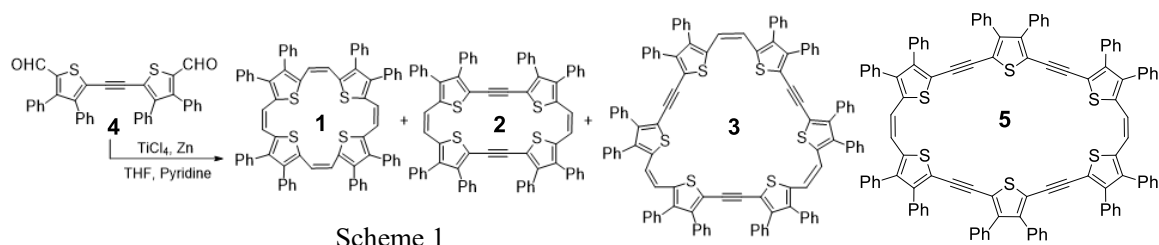
Synthesis and Hydrocarbon Capture Phenomena of Novel Phenyl-substituted π -Extended Cyclic Thiophene Hexamer (¹Graduate School of Environment and Information Sciences, Yokohama National University, ²Graduate School of Science, Nagoya City University, ³Graduate School of Science, Tokyo Metropolitan University)

○Yuta Watanabe,¹ Hiroyuki Otani,¹ Shinobu Aoyagi,² Masahiko Iyoda³

π -Extended cyclic thiophenes possess a large inner cavity. These macrocycles show unique solid structures. We synthesized phenyl-substituted new cyclic tetramers and hexamers by McMurry Coupling. The hexamers exhibited morphological difference with color changes depending on the evaporating solvent. In addition, reflecting the porous solid structure of **3**, it was found to form cocrystals with strongly incorporated pentane and other hydrocarbons.

Keywords : π -Extended Macrocyclic Thiophenes; Morphological Changes; Hydrocarbon Capture Phenomena; Inner Cavity; McMurry Coupling Reaction

π 拡張環状チオフエンは、分子の持つ内部空孔と置換基の相互作用によって特異な固体状態を形成し、分子の多機能性を引き起こす。そこで、かさ高い置換基であるフェニル基が置換した新規環状 4 量体 **1,2** および 6 量体 **3** をジアルデヒド **4** の McMurry カップリング (Scheme 1) によって合成した。ただし、**1,2** は不安定で性質を調査できていないため、**3** の性質を詳細に発表する。さらに **3** を以前報告したフェニル置換環状 6 量体 **5** と比較・検討した。



6 量体 **3** は濃縮する溶媒によって、色調の変化を伴うモルフォロジー変化を示した。また、ペンタンを含んだ **3** の単結晶 X 線構造解析の結果 (Figure 1)、隙間の多い結晶構造を反映して、マクロサイクル内にペンタンを強固に取り込んだ結晶を作ることがわかった。さらに、この結晶は 60°C・減圧乾燥してもペンタンが抜けなかったことから、炭化水素が隙間に取り込まれやすい構造であることがわかった。同様の取り込みはヘキサンおよびヘプタン等の炭化水素でも観測された。

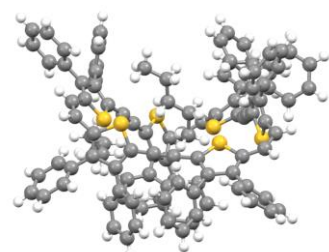


Figure 1