

アントラセンを基盤とした大環状ケージ化合物の合成とフラーレンとの錯体形成

(東工大理) ○三谷 拓示・鶴巻 英治・豊田 真司

Synthesis of anthracene-based macrocyclic cage compounds and their complex formation with fullerenes (*School of Science, Tokyo Institute of Technology*) ○Takuji Mitani, Eiji Tsurumaki, Shinji Toyota

We reported the ring and cage compounds based on 2,7-anthrylene units, which formed inclusion complexes with fullerene via CH- π interactions. Herein, we synthesized new cages by using diarylanthracene units to investigate the structure of complex and the association behavior.

The target cage compounds were synthesized from anthracene and triptycene units by Suzuki-Miyaura coupling followed by Yamamoto coupling. The cage **1** formed a host-guest complex with C₆₀ as revealed by ¹H NMR and fluorescence measurements. We confirmed that a C₆₀ molecule was included in the middle of cage cavity in the X-ray structure. The results of complexation with other fullerenes and the substituent effects on association will be presented.
Keywords : Anthracene; Cage compound; Macrocyclization; Coupling reaction; Host-guest

当研究室では、2,7-二置換アントラセンを基盤とした大環状リング[1]およびケージ形化合物[2]を合成し、これらの化合物が CH- π 相互作用によってフラーレンを包接することを報告した。しかし、ケージ錯体の構造や会合に及ぼす置換基効果については詳細な情報が得られていない。そこで本研究は、効率的に調製可能なジアリールアントラセンユニットを用いて新規ケージを合成し、錯体の構造と会合挙動を調べた。

目的とするケージは、アントラセンユニットとトリプチセンユニットから Suzuki-Miyaura カップリングと Yamamoto カップリングにより合成した。¹H NMR スペクトルでは、ケージに C₆₀ を加えると錯体形成に伴いシグナルの移動が観測された。蛍光スペクトルの滴定測定を行い、メシチル基を持つケージ **1** と C₆₀ の会合定数 K_a を $2.1 \times 10^4 \text{ L mol}^{-1}$ と決定した。また、**1** の C₆₀ 錯体の単結晶 X 線構造解析に成功し、C₆₀ 分子がケージ内に包接されていることを確認した (Fig. 1)。C₆₀ 以外のフラーレンとの錯体形成、会合に及ぼすケージの置換基効果についても報告する。

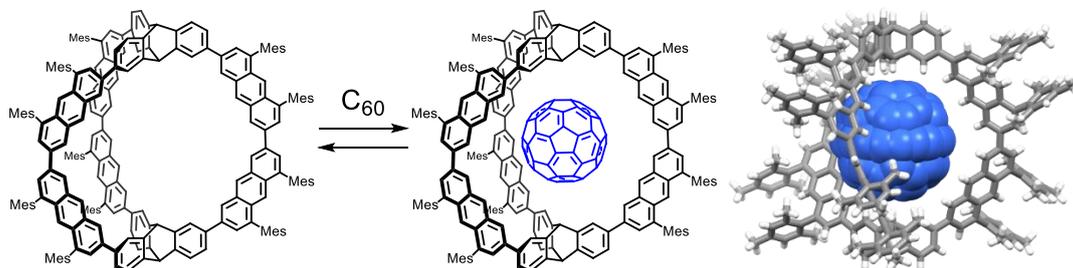


Fig 1. Complexation of cage **1** and C₆₀ and X-ray structure of their complex

[1] Y. Yamamoto, *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 8199.

[2] K. Kajiyama, *et al.*, *ChemPlusChem* **2021**, *86*, 716.