

α, α' -ジアニリノトリピリンの二重らせん形成におけるメゾ置換基効果

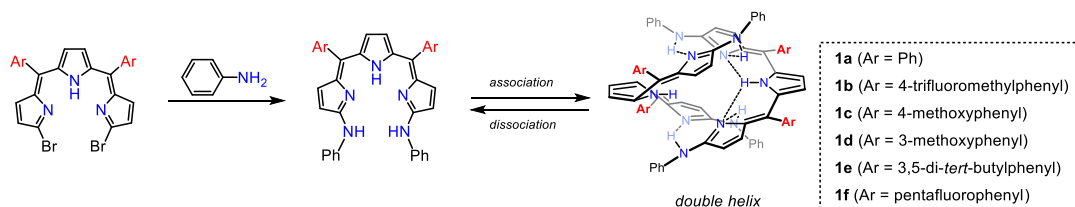
(京大院理¹、京大院工²) ○西山 綾音¹・植田 賢人¹・梅谷 将隆¹・赤松 由貴¹・田中 隆行^{1,2}

Substituent effects at meso-positions of α, α' -dianilinotripyrrins on double-helix formation (*Graduate School of Science, Kyoto University*¹, *Graduate School of Science, Kyoto University*²) ○Ayane Nishiyama¹, Kento Ueta¹, Masataka Umetani¹, Yuki Akamatsu¹, Takayuki Tanaka^{1,2}

Artificial double helix motifs have attracted interests in terms of not only mimicking biological functions but also their structures, dynamic behaviors and chiroptical properties. Recently, we reported that α, α' -dianilinotripyrrin **1a**, which is a linearly linked oligopyrrole consisting of three pyrrole units, two methine carbons, and two terminal aniline moieties, self-assembles to form a double-helical structure due to the interstrand hydrogen bonding interaction. The association constants changed significantly with different aniline derivatives. In the present study, we investigated the effect of *meso*-substituents on the dimerization dynamics of α, α' -dianilinotripyrrins. We have synthesized dianilinotripyrrins **1b-f** with various aryl *meso*-substituents and determined their association constants (K_{dim}) in solution.

Keywords : tripyrrin, double helix, hydrogen bonding, substituent effect, nucleophilic aromatic substitution

人工二重らせん分子は生体模倣のみならず、構造や動的挙動、キラル光学特性の観点から関心を集めている。近年我々は、三つのピロール部位が二つのメチン炭素によって架橋されたトリピリン骨格に対し、両端の α 位にアニリン誘導体を修飾した α, α' -ジアニリノトリピリン **1a** が、水素結合により自発的に二重らせん型二量体を形成することを報告した¹⁾。また、異なるアニリン誘導体を修飾すると、会合定数が大きく変化した。そこで今回、ジアニリノトリピリンにおいて、メゾ位の置換基が二重らせん構造形成に及ぼす影響を調べた。メゾ置換基が様々なアリール基のジアニリノトリピリン **1b-f** を合成し、それぞれ溶液中での会合定数(K_{dim})を算出した。



1) M. Umetani, T. Tanaka, A. Osuka, *Chem. Sci.*, **2018**, 9, 6853.