

側鎖に尿素基を導入した銀食い分子による Ag^+ と X^- の同時捕捉

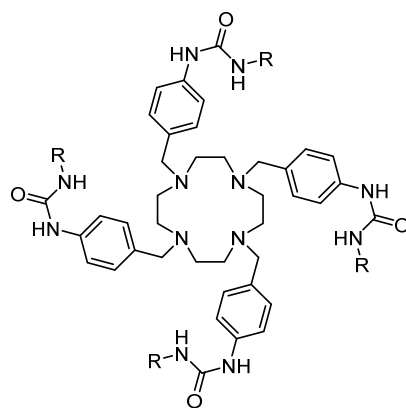
(東邦大理¹・東邦大複合物性研究セ²・江陵原州大理³・千葉工大工⁴) ○宮内 彩咲¹・朱 喜英¹・李 恩智³・池田 茉莉⁴・桑原 俊介^{1,2}・幅田 揚一^{1,2}

Simultaneous capture of Ag^+ and X^- by argentivorous molecules having urea units in the side-arms (¹*Faculty of Science and* ²*Research Center for Materials with Integrated Properties, Toho University,* ³*Gangneung-Wonju National University,* ⁴*Faculty of Engineering, Chiba Institute of Technology*)) ○Asaki Miyauchi¹, Huiyeong Ju¹, Eunji Lee³, Mari Ikeda⁴, Shunsuke Kuwahara^{1,2}, Yoichi Habata^{1,2}

Many anion recognition systems have been reported. Here, we report new tetra-armed cyclens (**L1-L9**) with $-\text{NHC}(=\text{O})\text{NH-R}$ or $-\text{NHC}(=\text{O})\text{NH-Ar}$ groups at the 4-position of the aromatic side-arms that can simultaneously bind anions (OTf^- , NO_3^- , PF_6^- , BF_4^- , F^- , and Cl^-) only in the presence of Ag^+ ions. It is known that aromatic side-arms of tetra-armed cyclens cover the Ag^+ ions when they form complex with Ag^+ ions. Therefore, we predicted that when these ligands form Ag^+ complexes, a pseudo-cavity is formed by the four urea groups that can bind anions, and capture Ag^+ and anions simultaneously. As a result of X-ray crystallography of the complexes, we found that the urea groups of the side chains have several patterns for trapping anions depending on the type of terminal substituents. The selectivity for anions is also being investigated and will be reported.

Keywords : Cyclen; Silver Complex; Molecular Recognition; Anion; Urea

これまで数多くのアニオン認識システムが報告されている。本研究では Ag^+ イオンが存在したときにのみ陰イオン (OTf^- , NO_3^- , PF_6^- , BF_4^- , F^- , Cl^-) を同時捕捉できる化合物を開発することを目的として、側鎖芳香環の 4-位に $-\text{NHC}(=\text{O})\text{NH-R}$ または $-\text{NHC}(=\text{O})\text{NH-Ar}$ 基を導入したテトラアームドサイクレン (**L1-L9**) を合成した。これらの化合物ではサイクレン環が銀イオンと錯体を形成すると芳香環側鎖が銀イオンを覆うようにコンホメーション変化し、4 個の尿素基による疑似空孔が形成されることで Ag^+ と陰イオンを同時捕捉させることができると期待した。単結晶が得られた錯体について X 線結晶構造解析を行った結果、末端置換基の種類によって側鎖の尿素基が陰イオンを捕捉するためにいくつかのパターンがあることを見出した。現在、陰イオンに対する選択性についても検討しており、これについても併せて報告する。



L1: R = Et **L2:** R = *n*-Bu **L3:** R = *n*-Oct
L4: R = *c*-Hex **L5:** R = Ph **L6:** R = 4-F-Ph
L7: R = 3-F-Ph **L8:** R = 2-F-Ph **L9:** R = 4-NO₂-Ph