

カチオン性  $M_{12}L_{24}$  球状錯体の内部における  
カチオン性ホスト-ゲスト相互作用の発現  
Cationic Host-Guest Interaction within Cationic  $M_{12}L_{24}$  Spherical Complexes

佐藤宗太<sup>1</sup>, 藤田 誠<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> 東北大学原子分子材料科学高等研究機構, 〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1

<sup>2</sup> 東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻, 〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

Sota Sato<sup>1</sup> and Makoto Fujita<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>WPI-AIMR, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8578, Japan

<sup>2</sup>Department of Applied Chemistry, School of Engineering, The University of Tokyo  
7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, 113-8656, Japan

### 1 はじめに

われわれの研究グループでは、自己組織化を利用した多成分からなる錯体の合成とその化学修飾を通じた機能発現に取り組んできている。例えば、フッ素性置換基を化学修飾した折れ曲がった有機配位子(L)と遷移金属イオン(M)から、内部にフッ素性官能基が集積された  $M_{12}L_{24}$  組成の球状錯体が得られることを報告している[1]。得られる錯体は直径が数ナノメートルを超える巨大な中空構造であるが、その構造は分子レベルで厳密に整っており、放射光 X 線を用いることで単結晶構造解析による構造決定が可能となる。今回、共同研究によって、Stoddart グループのホスト-ゲスト化学を球状錯体の内部で発現させることに成功した[2]。

### 2 実験

Stoddart グループのゲスト分子に対応する部分構造を有機配位子 L に共有結合を介して連結した。この配位子とパラジウム(II)イオンとの自己組織化によって、 $M_{12}L_{24}$  球状錯体を構築した。得られた錯体は核磁気共鳴(NMR)や質量分析(MS)によって構造決定し、最終的に単結晶を作成できたことから、放射光 X 線を用いた結晶構造解析を行い詳細な構造を決定することができた(図 1)。この錯体の溶液に対して、ホスト分子を後から加え、反応の進行を NMR や UV-vis スペクトルなどを用いて追跡した。

### 3 結果および考察

通常は、静電反発が生じるカチオン性のホスト-ゲスト分子をカチオン性の錯体内部にとじ込めることは難しい。非常に大きく安定な球状錯体を使い、信頼性の高いホスト-ゲスト相互作用を適用することで構造構築を達成できた。各種の分析法を併用することで、球状の錯体骨格を維持したまま内部でホスト-ゲスト相互作用が発現することを見いだした。

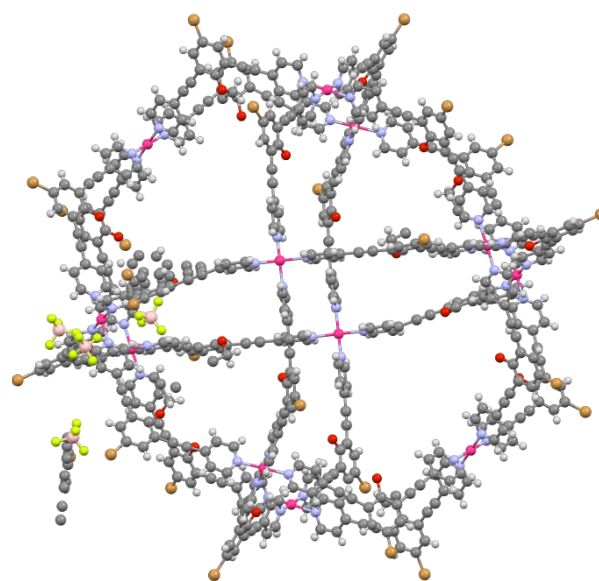


図 1：放射光 X 線構造解析によって明らかになった球状錯体の構造。立方八面体型の多面体構造をとる。

### 4 まとめ

自己組織化によって構築した、カチオン性の球状錯体の内部空間を使い、カチオン性のホスト-ゲスト相互作用を発現させることに成功した。ゲストに相当する部位を内部に化学修飾した、36 成分からなる巨大な球状錯体の構造を、放射光 X 線を用いた単結晶構造解析によって明らかにできた。

### 参考文献

- [1] S. Sato, J. Iida, K. Suzuki, M. Kawano, T. Ozeki and M. Fujita, *Science* **313**, 1273 (2006).  
[2] C. J. Bruns, D. Fujita, M. Hoshino, S. Sato, J. F. Stoddart and M. Fujita, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 12027 (2014).

\* mfujita@appchem.t.u-tokyo.ac.jp