

新規水素結合モチーフとしてのベンジリデンマロナミド：水素結合性有機多孔質構造(HOFs)への応用

(東理大理) ○志田 明依・土戸 良高・河合 英敏

Benzylidenemalonamides as a Novel Hydrogen-bonding Motif: Application to Hydrogen-bonded Organic Frameworks (HOFs) (*Faculty of Science, Tokyo University of Science*)

○Mei Shida, Yoshitaka Tsuchido, Hidetoshi Kawai

In this study, we focused on benzylidenemalonamide derivatives as a motif that is easier to synthesize and can be assembled into 2D-sheets or 3D-lattice structures for Hydrogen-bonded Organic Frameworks (HOFs). We first investigated the hydrogen-bonding ability of various benzylidenemalonamide derivatives in crystals. Based on this knowledge, we designed and prepared a derivative with two benzylidenemalonamide moieties linked by a 1,4-phenylene spacer for HOF formation. We found that **1A** crystallized as a 3D-lattice structure containing DMF and it was also possible to desorb DMF and that exchange guests with water or dioxane. **Keywords** : *Hydrogen Bonding, Amide, Hydrogen-bonded Organic Framework, Guest Adsorption/desorption Capability*

水素結合性有機多孔質構造(HOFs)は自己修復性、非金属性などの利点をもつ多孔質材料として注目を集めている。本研究では HOFs の構築に向けて、二次元シートや三次元格子構造へ集積させるためのより合成容易なモチーフとしてベンジリデンマロナミド誘導体に着目した。これらはこれまでに X 線構造が全く報告されていなかったことから、はじめに種々の誘導体($R^1=H, Me, Ph$)の結晶中での水素結合能を調査した。いずれも結晶中で二次元シート構造を形成できることが確認されたが、特に置換基 R^1 にフェニル基をもつ誘導体において空隙の大きな集積構造が形成されやすいことを見出した。この知見をもとに 2 つのベンジリデンマロナミド部を 1,4-フェニレンスパーサーで架橋した化合物 **1A** を合成したところ、結晶中でマロナミドあたり 6-7 本の多重水素結合により三次元格子構造に集積することが明らかになり、その空孔には DMF が水素結合形成により取り込まれていることがわかった。さらに、結晶性を維持しながらゲストの DMF を水やジオキサンと交換することも可能だった。

