

2,2'-チオジフェノール誘導体と 1-ピレンカルボン酸を配位子とする四核亜鉛錯体の結晶による有機分子の選択的捕捉

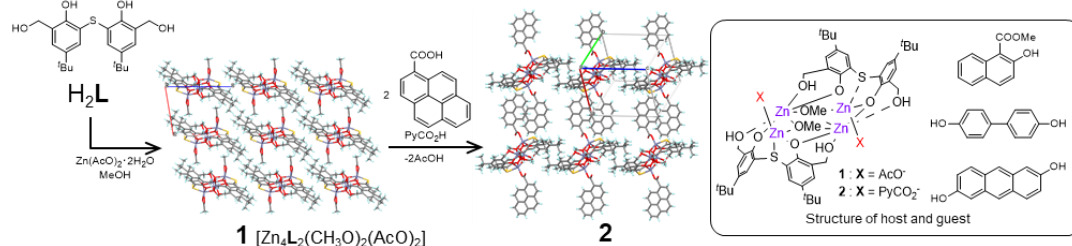
(東北大院工) ○下河原 佑衣・原 佳祐・佐藤 玲温・諸橋 直弥・服部 徹太郎
 Selective collection of organic molecules with crystals of a tetranuclear zinc complex ligated by 2,2'-thiodiphenol derivative and 1-pyrenecarboxylic acid (*Graduate School of Engineering, Tohoku University*) ○Yui Shimokawara, Keisuke Hara, Reon Sato, Naoya Morohashi, Tetsutaro Hattori

For the establishment of separation method for organic compounds with low environmental load, the development of separation materials that can efficiently and selectively collect target molecules has been desired. We previously reported the selective inclusion method of organic molecules with crystals of *p-tert*-butylthiacalix[4]arene (**TCA**).¹ To expand guest-scope, we have also studied the development of metal complex type host ligated by 2,2'-thiodiphenol derivative (**H₂L**) having partial structure of **TCA**. In this study, we try the selective inclusion of organic molecules using the guest recognition space in the crystals of a tetranuclear zinc complex ligated by **H₂L** and 1-pyrenecarboxylic acid. Treatment of tetranuclear zinc complex **1**, which was prepared by the reaction of **H₂L** and Zn(OAc)₂·2H₂O, with 1-pyrenecarboxylic acid affords complex **2** having wide-space in the crystal. By the combination of the simulation for the structure of inclusion crystals with guest and the experimental evaluation of the inclusion ability, it was found that the crystal of **2** can selectively include several guest molecules in the presence of similar structural compounds.

Keywords : Host crystal, Metal complex

低環境負荷な有機化合物精製法の確立のため、目的化合物を高効率・高選択的に捕捉する分離材料の開発が望まれている。我々は、*p-tert*-ブチルチアカリックス[4]アレーン(**TCA**)の結晶による有機分子の選択的捕捉に成功している¹⁾。さらなるゲスト適用性の拡張を指向して、**TCA** 部分構造である 2,2'-チオジフェノール誘導体(**H₂L**)を配位子とした金属錯体型ホストの開発を行っている。本研究では、**H₂L** と 1-ピレンカルボン酸を配位子とした四核亜鉛錯体の結晶中におけるゲスト認識空間を用いた有機分子の選択的捕捉について検討した。

H₂L と酢酸亜鉛二水和物から四核亜鉛錯体 **1** を調製したのち、**1** と 1-ピレンカルボン酸から広い空間を持つ錯体 **2** の結晶を調製した。ゲスト包接結晶構造のシミュレーションと実験による包接能評価を組み合わせることにより、**2** の結晶が下図に示すようなゲスト分子を類似構造化合物共存下で高選択的に包接することを明らかにした。



1) N. Morohashi, T. Hattori, *J. Inclusion Phenom. Macrocyclic Chem.* **2018**, 90, 261.