

2, 6-ビス(1H-ピロール-2-イル)ピリジンを基盤としたかご状化合物の合成と物性

(埼玉大学¹・神戸大学²) ○木島 朋也¹・瀬恒 潤一郎²・石丸 雄大¹

Synthesis and Properties of Cage Compounds Based on 2, 6-Bis(1H-pyrrol-2-yl)pyridine

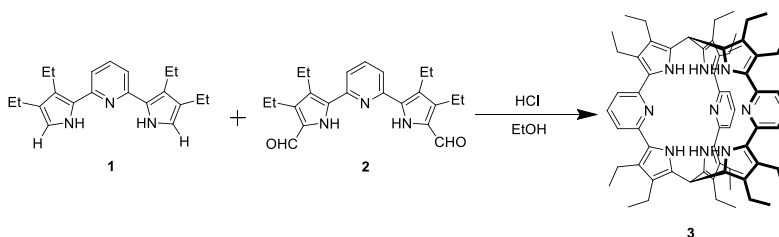
(¹Saitama University, ²Kobe University) ○Tomoya Kijima¹, Jun-ichiro Setsune², Yoshihiro Ishimaru¹

Cage compounds derived from 2,6-bis(3,4-diethyl-2-pyryl)pyridine (1) are recognized for their ability to encapsulate guest molecules within three-dimensional internal spaces. These compounds provide three crevices for guest binding and typically form 1:3 complexes with guest molecules capable of forming hydrogen bonds, such as alcohols and carboxylic acids. When the cage compound (3) forms hydrogen bonds, pyrrole and pyridine moieties act as hydrogen bond donors and acceptors, respectively. In this study, we synthesized cage compound (3) and investigated its molecular recognition behavior using a ligand distinct from those used in previous studies. The details of the synthesis process are described below. The cage compound (3) was synthesized by refluxing 2,6-bis(3,4-diethyl-2-pyryl)pyridine (1) and the corresponding dialdehyde (2) in a 2:1 molar ratio in HCl/ethanol for 1 h. The molecular recognition behavior of the synthesized cage compound (3) was subsequently studied using halogen ions as guest molecules.

Keywords : Molecular recognition; Cage compound

2,6-ビス(3,4-ジエチル-2-ピリル)ピリジン **1** を基盤としたかご状化合物は、三次元の内部空間にゲストを包接することが知られている¹⁾。ゲスト分子に対して3つの隙間を提供することが可能であるため、アルコールやカルボン酸などの水素結合形成が可能なゲスト分子と1:3の錯形成をすることが知られる。このかご状化合物 **3** が水素結合を形成する際には、ピロールとピリジンが水素結合アクセプターとして働く。本研究では、このかご状化合物を合成し、先行研究とは異なるリガンドを用いた分子認識を検討した。詳細を以下に示す。

2,6-ビス(3,4-ジエチル-2-ピリル)ピリジン **1** と対応するジアルデヒド **2** を2:1のモル比で塩酸/エタノール中、1時間還流させることでかご状化合物 **3** が得られた。今回かご状化合物 **3** に新たにゲスト分子としてハロゲンイオンを用いて、分子認識に関する研究を行った。



1) J.-i. Setsune and K. Watanabe, *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, *130*, 82404–2405