

新奇ハニカム型大環状キノリンオリゴマーの合成

(慶大院薬¹・微化研²) ○田代 奨吾¹・シュ ウエイ¹・熊谷 直哉^{1,2}

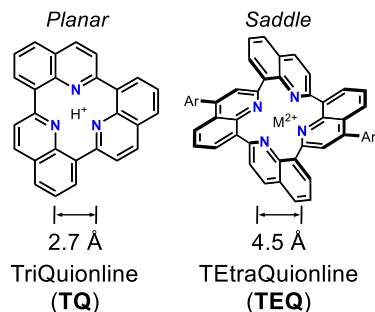
Synthesis of Novel Honeycomb-shaped Macrocyclic Quinoline Oligomers (¹*Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Keio University,* ²*Institute of Microbial Chemistry*) ○Shogo Tashiro,¹ Wei Xu,¹ Naoya Kumagai^{1,2}

Our research group has synthesized 2,8-linked macrocyclic quinoline oligomers that exhibit unique and distinctive physicochemical properties. Among these, the quasi-planar trimer TriQuinoline (**TQ**)¹ and the saddle-shaped tetramer TEtraQuinoline (**TEQ**)² demonstrated notable characteristics, including a pronounced affinity for protons or metal cations. To further expand the structural versatility of quinoline oligomers, we designed and synthesized a novel honeycomb-shaped molecular framework, HexaQuinoline (**HQ**). This new molecular entity features an expanded central cavity with an average diagonal nitrogen-nitrogen distance of 7.6 Å, providing potential for the encapsulation of organic molecules. As a structural analog of **HQ**, **BzQ2Q4** (**BzQ**: BenzoQuinoline), was synthesized by the intramolecular quinoline skeleton formation from a cyclic diamide precursor. The resulting **BzQ2Q4** structure is anticipated to manifest a π -wall cage framework capable of hosting small molecules within its cavity through π - π /CH- π interaction.

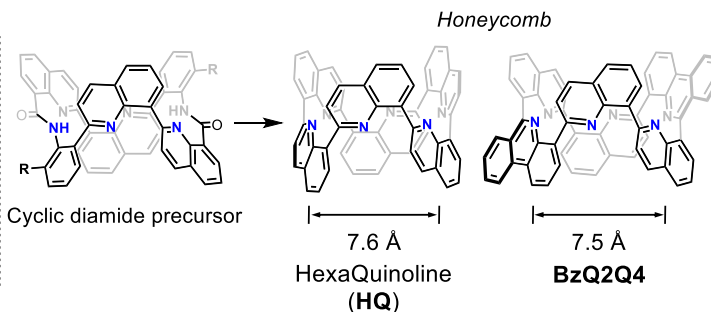
Keywords : Quinoline, Macrocyclic compound, Heterocyclic compound

大環状化合物は、その環サイズや環空孔のヘテロ原子配置に依存して金属や小分子を特異的に包摂するゲスト分子として機能する。我々は、2環性の10原子 π 平面と配位性ピリジル窒素を特徴とするキノリンに注目し、キノリンを単位ユニットとする2,8位連結型環状分子を合成した。剛直な擬平面構造を有する環状3量体 TriQuinoline (**TQ**)¹、立体化した S_4 対称サドル構造を有する環状4量体 TEtraQuinoline (**TEQ**)²は魅力的な分子機能を発揮するが、有機分子を包摂可能なキノリンオリゴマー型大環状分子の構築には至っていない。そこで本研究では、キノリンユニットのさらなる漸増により中心空隙を拡大したハニカム型キノリン6量体 HexaQuinoline (**HQ**)を新たにデザインし、前駆体ジアミドに対する分子内キノリン骨格形成反応により **HQ** 類縁体である **BzQ2Q4** を合成した。**BzQ2Q4** はその π -wall cage 構造から、 π - π /CH- π 相互作用により空孔内に小分子を包摂する超分子錯体形成能有すると期待される。

Previous work



This work



1. S. Adachi, M. Shibasaki, N. Kumagai. *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 3820.
2. W. Xu, Y. Nagata, N. Kumagai. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 2609.