ゲート部位に動的共有結合を有するロタキサンの合成研究

（東工大理）○竹内 睦・佐瀬 祥平・鍬野 哲・後藤 敬

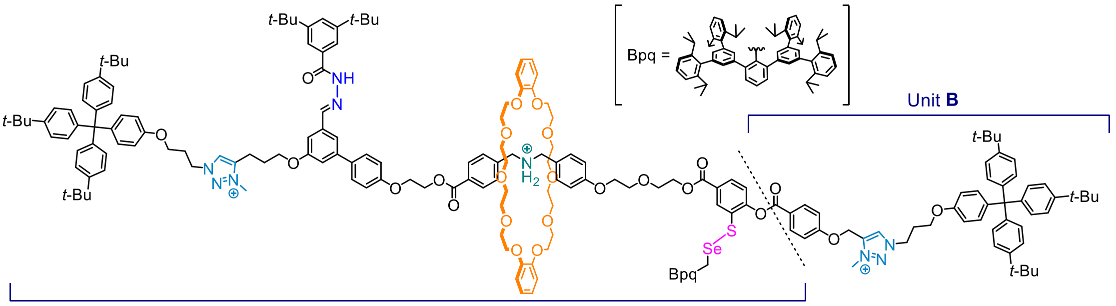
Synthetic Study of Rotaxanes with Dynamic Covalent Bonds at the Gate Unit (*School of Science*, *Tokyo Institute of Technology*) ○Mutsumi Takeuchi, Shohei Sase, Satoru Kuwano, Kei Goto

Rotaxanes have a shuttling function in which a ring moves on an axle molecule by giving specific external stimuli, and this function is applied to various molecular machines. One of these functional systems is a gated rotaxane, which highly controls the movement of the ring by a bulky substituent on the axle molecule. Most of the gated rotaxanes reported so far have one gate on a linear axle, and the ring moves between the two interaction sites. Here we report the design and synthesis of a novel [2] rotaxane which has two gates with different types of dynamic covalent bonds, i.e., a selenenyl sulfide bond and an imine bond, as well as three interaction sites on the axle molecule.

Keywords : Dynamic Covalent Bonds, Selenenyl Sulfide Bonds, Rotaxanes, Molecular Machines, Molecular Shuttles

ロタキサンには特定の外部刺激を与えることで軸分子上を環が移動するシャトリング機能があり、様々な分子機械に応用されている。そのうちの一つに、軸分子上のかさ高い置換基によって環の移動を制御するゲート付きロタキサンがある。従来のゲート付きロタキサンの多くは直線状の軸上にゲートを 1 つもち、2 つの相互作用部位の間を環が移動するものであった。既に我々は、ゲート部位に動的共有結合としてセレネニルスルフィド結合を導入したゲート付き分子シャトルの合成について報告している [1]。今回、軸分子上に 2 種類の動的共有結合（セレネニルスルフィド結合およびイミン結合）による 2 つのゲートと 3 つの相互作用部位を備えた、新規な[2]ロタキサンの合成について検討した。

設計したロタキサンは、軸分子上に 2 つのトリアゾリウムユニットと 1 つのアンモニウムユニットを含み、それぞれイミン結合ゲートおよびセレネニルスルフィド結合ゲートを間に挟んで配置されている。ロタキサンユニット **A** をセレネニルスルフィド結合の動的共有結合を用いたエンタリング法により構築した後、ユニット **B** を連結する合成経路について検討した結果を報告する。



1) 石川里穂, 野田聡, 佐瀬祥平, 後藤敬, 日本化学会第 99 春季年会, 4H3-12 (2019).

© The Chemical Society of Japan