

らせん高分子ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)のらせん不斉保持溶媒の探索における機械学習の活用

(京大院工¹・産総研 触媒化学融合研究セ²) ○三浦 勇利¹・藤江 峻也¹・南 賀之¹・山本 武司¹・良永 裕佳子¹・杉野目 道紀¹・矢田 陽²

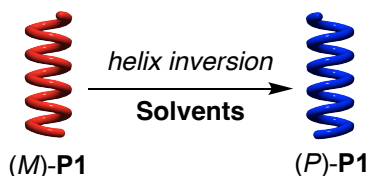
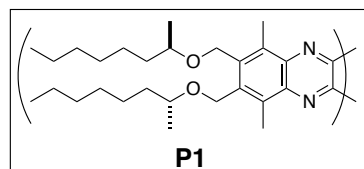
Solvent Effect on Retaining Helical Chirality of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s: Solvent Screening through Machine Learning (¹Graduate School of Engineering, Kyoto University, ²Interdisciplinary Research Center for Catalytic Chemistry (IRC3), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)) ○Yuri Miura¹, Takaya Fujie¹, Yoshiyuki Minami¹, Takeshi Yamamoto¹, Yukako Yoshinaga¹, Michinori Sugimoto¹, Akira Yada²

Much attention has been focused on the chirality control of helical polymer and its use for functional chiral material.¹ Helically chiral poly(quinoxaline-2,3-diyl)s (PQX) with chiral side chains have dynamic helical structures which can be influenced by solvents.² However, there has been limited study on the kinetic properties of helical PQX. In this study, we measured the rate of *M*-to-*P* helix inversion of PQX (**P1**) bearing chiral ether side chains. It turned out that the half-life ($t_{1/2}$) differed by more than 300 times depending on the solvents. We employed machine learning to find out the solvents that allow a slow inversion of (*M*)-**P1**.

Keywords : Helical Polymer, Circular Dichroism, Solvent Effect, Helix Inversion, Reaction Kinetics

機能性キラル材料の開発に向け、高分子の主鎖らせん不斉制御に注目が集まっている¹。キラル側鎖を有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)(PQX)は溶媒により主鎖のらせん不斉を完全に制御することが可能であり²、キラリティスイッチング材料としての利用が期待されている。我々はこれまでに、溶媒により誘起されるらせん不斉の巻き方向に関して平衡状態における熱力学的考察をおこなってきたが、機能性材料としての利用において重要となるらせん反転速度に関する知見は非常に限られていた。本研究では、キラルエーテル側鎖を有するPQX(**P1**)のらせん反転速度を測定し、その溶媒依存性について機械学習を活用した検討をおこなった。

左巻きのらせん不斉を誘起した(*M*)-**P1**を各種溶媒に溶解させ、右巻きのらせん構造が誘起される速度を測定したところ、らせん反転速度は一次の反応速度式で近似することができ、溶媒に依存して300倍以上変化することが明らかとなった。これまでの知見から、**P1**と強く相互作用する溶媒中ではらせん反転速度が低下するものと推測される。30種類以上の溶媒中における実測データから機械学習的手法を用い、らせん反転速度を低下させる溶媒探索をおこなったところ、**P1**の左巻き構造を長時間保持できる溶媒を新たに見出すことができた。



Solvents	half-life (s)
	2000
	700
	300
	20
	6

1) E. Yashima, N. Ousaka, D. Taura, K. Shimomura, T. Ikai, K. Maeda, *Chem. Rev.* **2016**, 116, 13752.

2) Y. Nagata, T. Yamada, T. Adachi, Y. Akai, T. Yamamoto, M. Sugimoto, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 10104.