

オルトゴナルな動的共有結合を活用したゲート付き分子シャトルの開発

(東工大理) ○濱條 奏真・竹内 睦・楢野 哲・後藤 敬

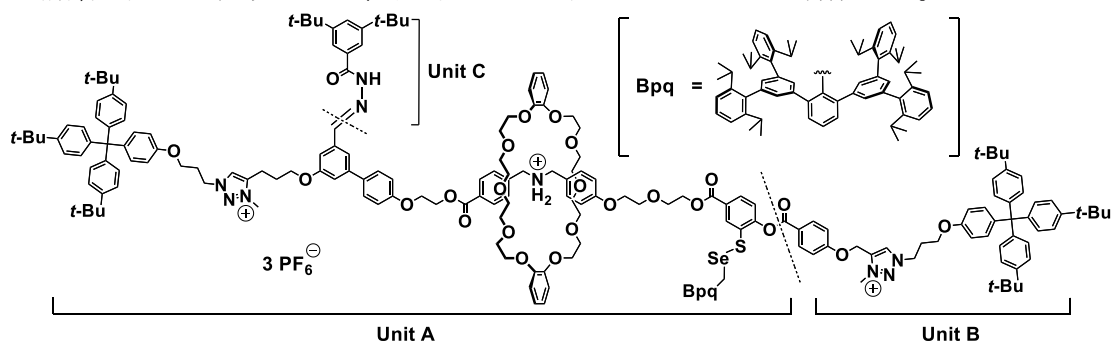
Development of a Gated Molecular Shuttle Utilizing Orthogonal Dynamic Covalent Bonds
(School of Science, Tokyo Institute of Technology) ○Soma Hamajo, Mutsumi Takeuchi, Satoru Kuwano, Kei Goto

Gated rotaxanes incorporating dynamic covalent bonds at the gating site allow precise control of shuttling. We have been investigating the development of functional molecular shuttles using the selenenyl sulfide (Se-S) bond as a dynamic covalent bond for the gating function. Here, we report the design and synthesis of a rotaxane with three recognition sites on the axial molecule and two orthogonal dynamic covalent bonds, Se-S and imine bonds, at the gating site.

Keyword : Rotaxanes; Molecular Shuttles; Dynamic Covalent Bonds; Selenenyl Sulfide Bonds

動的共有結合をゲート上に配置したゲート付き分子シャトルでは、ゲートが外部刺激により解離平衡状態となり、環がゲートをすり抜けて移動する。最近の例として、ジスルフィド(S-S)結合とイミン結合の 2 種類の動的共有結合を用いたゲート付きカタナンが報告されている¹⁾。しかし、S-S 結合を用いた場合、非対称構造の維持が困難という問題点がある。以前に我々は、セレネニルスルフィド(Se-S)結合が動的共有結合として機能することを見出し、Se-S 結合とイミン結合という 2 種類のオルトゴナルな動的共有結合をゲート部位に有するロタキサンの合成検討について報告している²⁾。今回、目的のゲート付きロタキサンの合成を達成したので報告する。

軸分子上に 3 つの相互作用部位を有し、ゲート部位として Se-S 結合とイミン結合をもつロタキサンを設計・合成した。ロタキサンのユニット A は、Se-S 結合を通じたエンタリング法により構築した。続いて、第二級アミンの Boc 保護を行った後、ユニット B を縮合反応によって連結し、Boc 基の脱保護と環の移動、およびユニット C の構築を同時に行うことで、目的のゲート付きロタキサンを合成した。



- 1) Cakmak, S. E.; Fielden, S. D. P.; Karaca, U.; Leigh, D. A.; McTernan, C. T.; Tetlow, D. J.; Wilson, M. R. *Science* **2017**, 358, 340-343.
- 2) 濱條奏真, 竹内 睦, 楢野 哲, 後藤 敬, 第 49 回有機典型元素化学討論会, PB-108 (2022).