

アミド基を有する超分子ロゼットの自己集合

(千葉大工¹・千葉大 IAAR²) ○柿沼俊輔¹・矢貝史樹²

Self-assembly of supramolecular rosette bearing amide groups

(¹Faculty of Engineering, Chiba University, ²Institute for Advanced Academic Research, Chiba University) ○Shunsuke Kakinuma,¹ Shiki Yagai²

Our group reported self-assembly of naphthalene regioisomers bearing barbituric acid and wedge-shaped aliphatic tails.¹ These molecules form cyclic hexamers by self-complementary hydrogen bonding, which further stack through π - π interaction to afford supramolecular polymers with linear and circular topologies.² Here, we newly synthesized regioisomers **1** and **2** with an amide group between naphthalene core and aliphatic tails (Figure 1a). Upon cooling hot monomer solutions of **1** and **2** in methylcyclohexane to room temperature, **1** formed flexible supramolecular polymers, whereas **2** afforded highly elongated helical supramolecular fibers. The impact of the introduction of the amide group and the regioisomerism of the naphthalene units on the self-assembly will be discussed.

Keywords: Hydrogen bond; Self-assembly; Supramolecular polymorphism; Supramolecular polymer; π - π stacking

当研究室は以前に、バルビツール酸および長鎖アルキル鎖で修飾されたナフタレン分子の位置異性体の自己集合について報告した。¹ これらの分子はバルビツール酸部位間の自己相補的な水素結合により環状六量体を形成し、これらが π - π 相互作用により積層することで超分子ポリマーを与える。² 本研究では長鎖アルキル鎖とナフタレンとの間にアミド基を導入した分子 **1** および **2** を新規に合成し、アミド基の水素結合が分子の自己集合に及ぼす影響について調査した (Figure 1a)。

メチルシクロヘキサン中に加熱溶解させたこれらの分子のモノマー溶液を室温まで冷却すると、**1** は柔軟な超分子ポリマーを与えた一方で、**2** は高次の螺旋状超分子ファイバーを与えることが原子間力顕微鏡 (AFM) 観察により確認された (Figures 1b,c)。ナフタレン部位における置換位置およびアミド基の導入が分子の自己集合に与える影響について議論する。

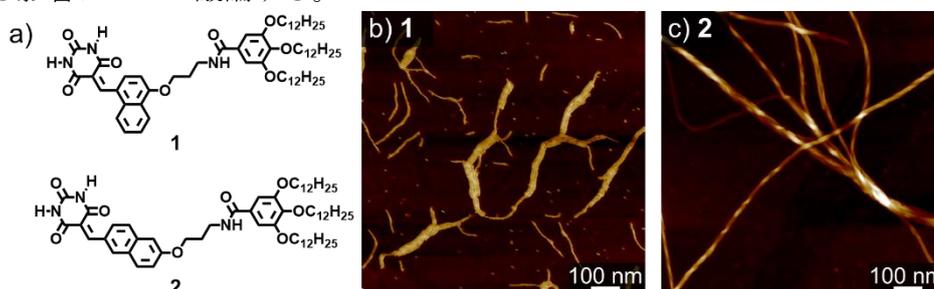


Figure 1. a) Molecular structures of **1** and **2**. b,c) AFM images of the supramolecular polymers of b) **1** and c) **2**.

1) S. Yagai et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 6643.

2) S. Yagai et al., *Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 1325; *Acc. Mater. Res.* **2022**, *3*, 259.