

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	橋本卓也
研究機関名	理化学研究所
所属部署名	開拓研究本部
役職名	主任研究員
研究課題名	新たな分子結合の創発と材料・医薬への応用
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

**研究成果の概要**

本研究では、独自の動的共有結合を利用した新たなかご状分子や COF といった共有結合性構造体、さらには高分子の合成などに取り組み、さらにそれら新たに創出された分子に機能を付与することを目指している。

2021 年度には主にかご状分子の合成に取り組み、2022 年度前半までに十あまりの内径の異なるかご状分子の合成に成功した。2022 年度途中より COF の検討を開始し、2023 年度中には、リンカー、溶媒、温度、触媒などあらゆる条件検討を行ったが、現在のところ規則的構造を持つ COF は確認されていない。動的共有結合自体は形成されていることが IR によって確認されており、構造の柔軟性が高すぎるものが問題と考えられる。また結合の弱さ（熱力学的安定性）が低いことも、もう一つの問題として浮かび上がった。2024 年度以降にこの改善を行う下地として、導入元素をさらに変更した動的共有結合様式の調査を行った。その結果、より熱力学的に安定で剛直性の高い結合様式を見つけることに成功している。また 2023 年度後半より、高分子への展開についても開始した。まずは既知法に倣って、鍵となる動的共有結合部分のみを独自の結合様式に変更した動的共有結合性高分子を合成した。動的共有結合に特徴的な物性は確認されており、今後さらに展開していく。また高分子についても、先述の COF で開発した第 2、第 3 の動的共有結合を導入することで、既報より優れた物性の創出を目指す。さらに 2023 年度には、この独自の動的共有結合を形成することで蛍光特性を生じる分子を発見した。その蛍光機構について実験・計算両面から調査を行い、現在推定機構を導出することまで成功している。