

2021 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	相良 剛光
研究機関名	東京工業大学
所属部署名	物質理工学院
役職名	准教授
研究課題名	超分子メカノフォアライブラリーの構築と新分野創発
研究実施期間	2021 年 4 月 1 日～2022 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本研究課題では pN オーダーの力を可視化する超分子メカノフォアを数多く作成し、ライブラリー化すること目指している。本年度は下記の 2 点について重点的に研究を進めた。

1. カテナン型超分子メカノフォアのモデル化合物の合成

幅広いレンジの力を可視化する超分子メカノフォアライブラリーを構築するにあたり、メカノフォアの activation energy を変更する必要がある。そのためには、異なるモチーフを用いた超分子メカノフォアの開発が鍵となる。我々の研究グループでは、ロタキサンや、シクロファン、さらに単純な Loop などのモチーフを使ったメカノフォアを開発してきた。本年度は、さらなるモチーフとして、ロタキサンと同じインターロック分子であるカテナンを用いた、「カテナン型超分子メカノフォア」のプロトタイプの開発を目指し、そのモデル化合物（ポリマーに共有結合を介して導入できない）の合成まで終えた。そして、得られた化合物の蛍光団からの蛍光は、溶液中で完全に消光していることを確認した。今後はさらなる構造最適化を行い、目的の「カテナン型超分子メカノフォア」を開発する予定である。

2. 小型化したロタキサン型超分子メカノフォアの構造探索

昨年度、力の印加により環状分子がストッパー部位をすり抜け、不可逆的な蛍光特性変化を示すロタキサン型超分子メカノフォアを報告したが (*J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 9884)、ストッパーの構造と環のすり抜け現象の相関関係が明らかとなっていなかった。また、プロトタイプのロタキサン (*J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 1584) と比較して、小型化には成功したものの、大きな力を印加しても環状分子が外れないロタキサンも作製する必要があった。そこで、ストッパー構造を様々に変更したロタキサンを設計・合成し、小型でありながら、環が抜けられないロタキサンの構造探索を行った。