

エステルおよびチオエステル結合を有する両親媒性分子水溶液中での液滴の構造転移

(慶大理工) ○川脇 勇人・朝倉 浩一・伴野 太祐

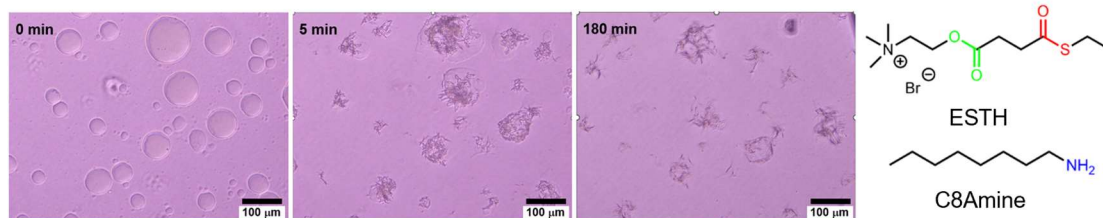
Structural Transition of Droplets in Aqueous Solution of Amphiphiles Having Ester and Thioester Linkages (*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○ Hayato Kawawaki, Kouichi Asakura, Taisuke Banno

Transformation of molecular self-assemblies into others with completely different properties triggered by chemical reactions has drawn considerable attention from the viewpoint of functional materials toward controlling the release and uptake of substances in response to the slight changes in environment. In this study, we focused on the amidation reaction between thioesters and amines and investigated the structural transition of molecular self-assemblies consisting of aliphatic amines in aqueous solution of the quaternary ammonium salt having ester and thioester linkages (ESTH). When octylamine was dispersed in ESTH aqueous solution, the structural transition from droplets to amorphous solids was observed after 3 h. From ^1H NMR analyses, the structural transition was considered by generation of monoamide and diamide compounds with a relatively high crystallinity through hydrolysis and amidation reactions of ESTH.

Keywords : *Molecular Self-Assembly; Structural Transition; Fatty Amines; Ester Linkages; Thioester Linkages*

化学反応をトリガーとして分子集合体が全く別の性質をもつ構造体へと転移する現象は、わずかな環境の変化に応じた物質の放出および取り込みの制御を指向した機能性材料の観点から注目されている。本研究では、生体内の穏やかな環境でも進行するチオエステルとアミンによるアミド化反応¹⁾に着目し、エステルおよびチオエステル結合を有する第四級アンモニウム塩 (ESTH) の水溶液中での脂肪族アミンからなる分子集合体の構造転移について検討を行った。

20 mM の ESTH 水溶液に同モル数のオクチルアミン (C8Amine) を分散させたところ、液滴から徐々に構造転移がみられ、3 時間後には非晶質な固体となった。調製直後の分散液の pH は 10.4 であり、一部の C8Amine が溶解し、中和されていることが考えられた。また、 ^1H NMR 測定より、試料中では ESTH のエステル結合の加水分解とともに、アミンとチオエステルのみならず、エステルとのアミド化反応の進行が認められた。以上の結果より、観察された構造転移は塩基性条件下での比較的結晶性の高いモノアミド化合物およびジアミド化合物の生成に伴う現象と推定された。



1) A. Torihata, K. Kuroda, *Synlett*. **2011**, 14, 2035.