アゾベンゼンユニットを有するキラル環状化合物の設計・合成お よび光応答性の評価

(東京理大院薬¹・東京理大総合院²・北大院理³) ○大瀧 正太郎¹・芝内 涼太¹・東條 敏史¹・棚田 法男³・景山 義之³・青木 伸¹²

Design, synthesis and evaluation of photoresponsive properties of chiral cyclic macro compounds containing azobenzene-unit. (\(^1\)Graduate School of Pharmaceutical Science, Tokyo University of Science, \(^2\)Reseach Institute for Science & Technology, Tokyo University of Science, \(^3\)Graduate School of Science, Hokkaido University) \(\sigma\) Shotaro Otaki,\(^1\) Ryota Shibauchi,\(^1\)Toshifumi Tojo,\(^1\)Norio Tanada,\(^3\)Yoshiyuki Kageyama,\(^3\)Shin Aoki\(^{1.2\).}

In recent years, many molecular machines whose structure is changed by redox, heat, light, and other external stimuli. However, there are few examples of molecular machines whose rotation is controlled in a one-directional manner. We focused on azobenzene, which is known to undergo reversible isomerization between *cis*- and *trans*-forms upon irradiation with UV and visible light. In this study, we design and synthesize chiral cyclic compounds with azobenzene moieties to control the direction of the rotational motion of photo- and thermal isomerization by intramolecular chirality.

The chiral cyclic compounds consisting of an azobenzene unit were synthesized and their structural change upon UV and visible light irradiation was observed using NMR, UV-Vis absorption and circular dichroism (CD) spectra in organic solvents. Furthermore, the relationship between the structure and CD spectra of these compounds was studied by TD-DFT (time-dependent density functional theory). In this paper, these results will be reported. Keywords: Molecular machine; Azobenzene; Photoisomerization; Chiral macrocycles

近年、酸化還元・熱・光などによって構造制御される分子機械が数多く報告されている。しかし、単一方向に回転を制御した分子機械の例は少ないのが現状である。我々は、紫外線および可視光線の照射により、cis型と trans型の間で可逆的な異性化が起こることが知られているアゾベンゼンに着目した。本研究では、アゾベンゼン骨格を有するキラル環状化合物を設計・合成し、光および熱異性化の回転運動を分子内キラリティーによって制御することを目指した。

目的のキラル環状化合物を合成し、有機溶媒中での紫外線照射と可視光照射による化合物の挙動を NMR、UV-Vis 吸収スペクトル、円二色性 (CD) スペクトルを用いて観測した。さらに、TD-DFT (時間依存的密度汎関数)により、化合物の構造と CD スペクトルの関係を検討した。本発表では、これらの結果について発表する予定である。