ナノサイズの単軸回転型分子ベアリング、水素結合のリレーで軸回転

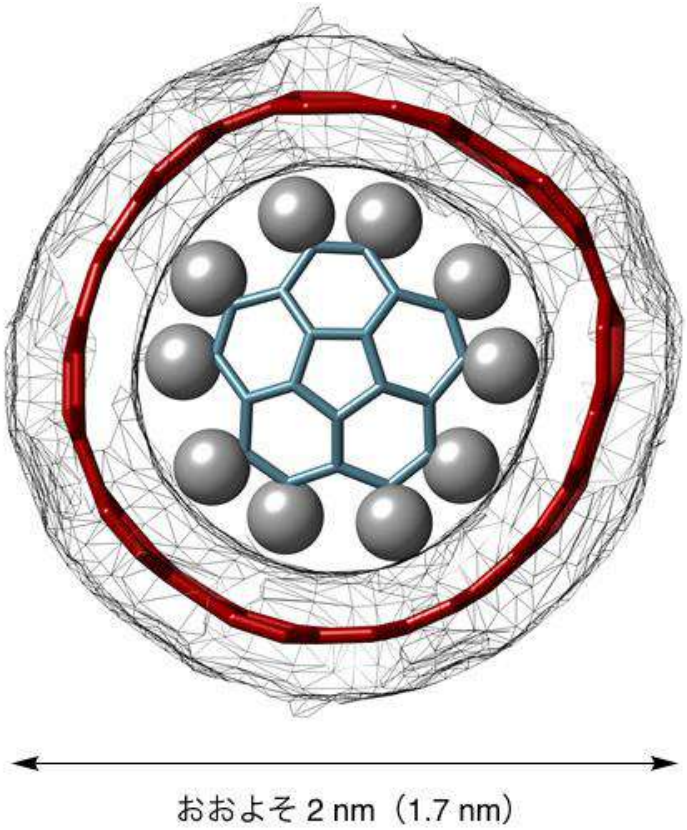
東京大学の研究グループは、ナノメートルサイズのボウル状分子が筒状分子の中で、１つの軸を中心に回転（単軸回転）することを発見しました。この単軸回転現象は、固体試料中で観測されました。今後、新しい分子機械の設計に活用されることが期待されます。

研究グループは、これまでに「球」と「筒」を組み合わせた分子ベアリングを作り出していましたが、今回「ボウル」と「筒」を組み合わせ、単軸回転という方向性のある運動性が実現できることを明らかにしました。「ボウルと筒」からなる分子ベアリングは、芳香族水素と芳香族π電子の間の相互作用「CH-π水素結合」が10個、関わることで、自発的に組み上がりました。

水素結合は、相互作用する分子同士の位置や距離を固定する結合として自然界で活用されていますが、本研究成果により、複数の水素結合を組み合わせながら、分子の回転運動が実現できることが判明しました。これは「固体の中や、分子間相互作用がたくさんあると、分子の位置が固定されるので、分子はじっとしているはず」という常識に相反する発見です。

本研究成果は、国際学術雑誌「Nature Communications」に2018年9月17日に掲載されました。

今回、研究グループは、CH-π水素結合と呼ばれる新しい水素結合を活用して、ボウルのような形をしたボウル状分子を筒のような形をした筒状分子の中に捉えることに成功しました。ナノメートルサイズの小さなベアリングの登場です（図 1)。ボウル状分子はコランニュレンという分子で、筒状分子は研究グループが独自に設計・合成したカーボンナノチューブの部分構造となる分子です。



おおよそ 4 cm

図１　単軸回転を実現した「ボウルと筒」の分子ベアリング（上図）

図 1 は、その分子構造を示すものですが、この構造中、球で示された水素原子（灰色）が炭素原子の筒（赤色）の中で滑ることで、中央のボウル（青色）が回転できるようになっています。水素原子と炭素原子の接触点が、CH-π水素結合と呼ばれる新しい水素結合でできているところです。CH-π水素結合は水素結合の中でも弱い相互作用ですが、今回の分子の間には、これが 10 個存在するために、ボウル状分子が筒状分子の中に強固に捉えられていました（図 2、3）。一つ一つの力が弱くとも、それを複数用いると、その相互作用が加算され、全体として大きな相互作用となるためです。

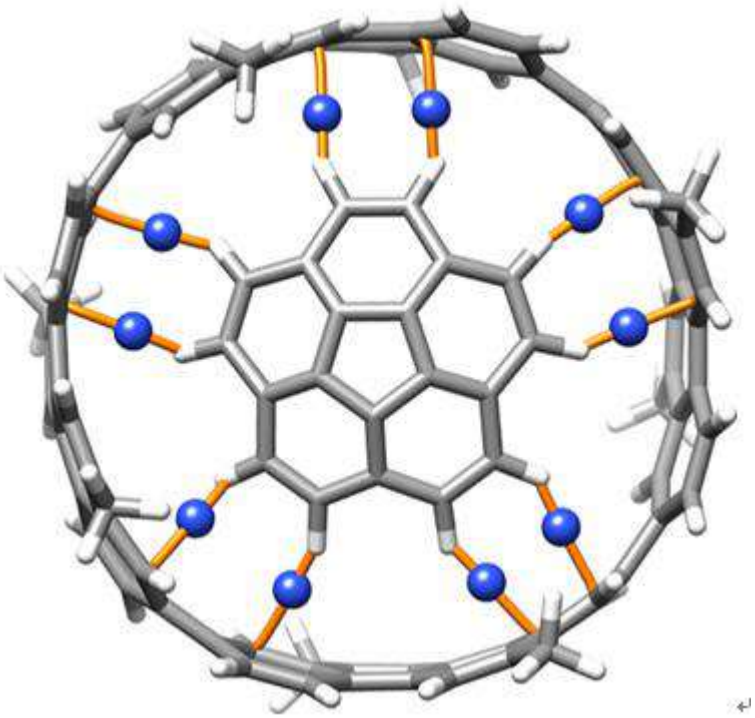


図２　量子化学計算により明かされた「ボウルと筒」の分子ベアリングの姿

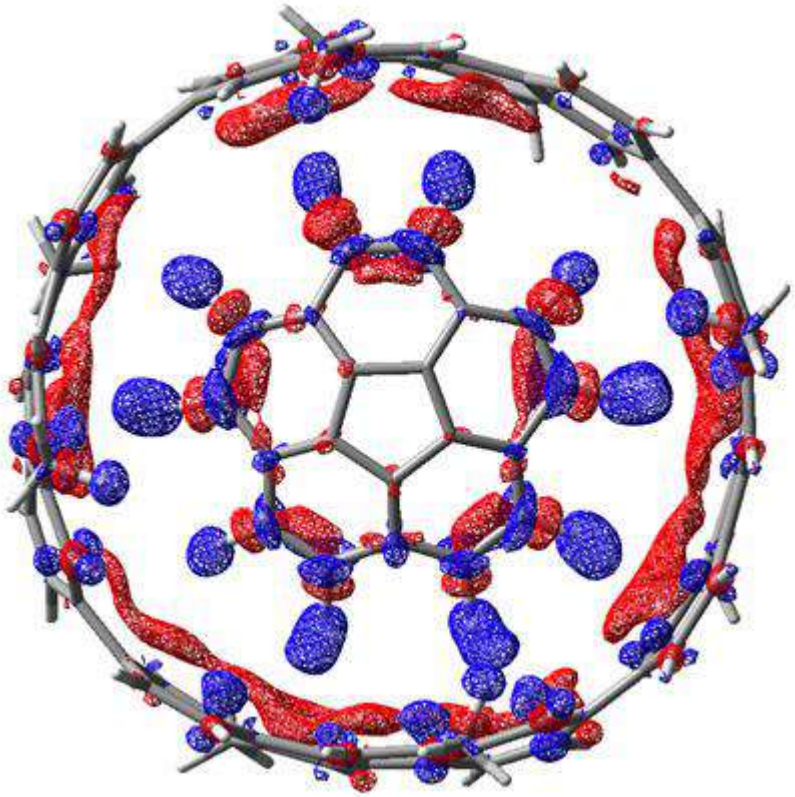


図３　量子化学計算により明かされた「ボウルと筒」の分子ベアリングの姿

図 4 は、結晶構造解析により、実験的に解き明かされた分子構造です。この結晶構造解析の結果は、ボウル状分子が筒状分子内で回転している可能性を示唆しました。ボウル状分子が、その中心軸周りで複数の位置に存在することが見いだされたのです（図 4)。

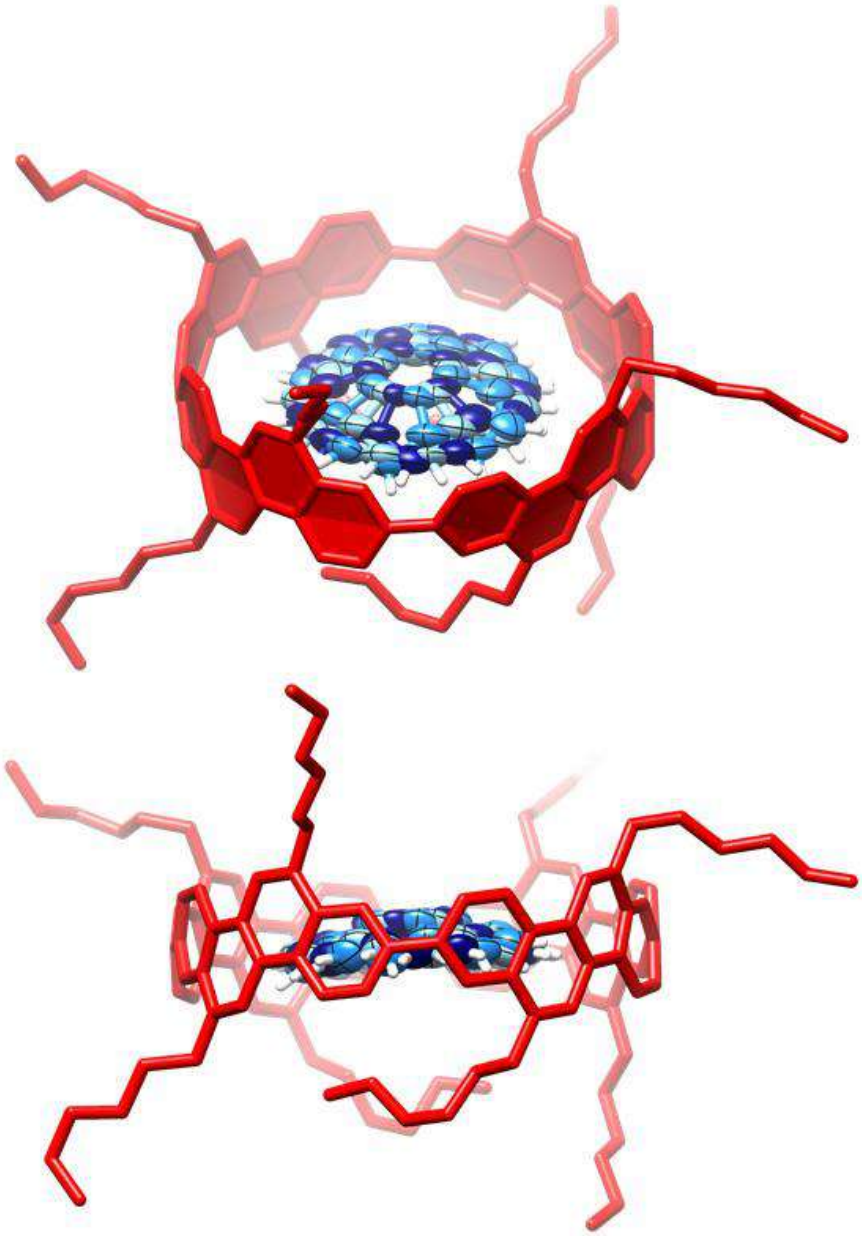


図４　結晶構造解析により明らかになった「ボウルと筒」の分子ベアリングの姿。斜め上から見た図（上）と横から見た図（下）

日文发布全文 https://www.jst.go.jp/pr/announce/20180917/index.html