

1. モーターを介する分子内輸送は分子間輸送が起こっていることはないか？
 論文中に輸送が起こる単段階ずつアセチル基が輸送されていく様子が NMR チャートにより示されています。

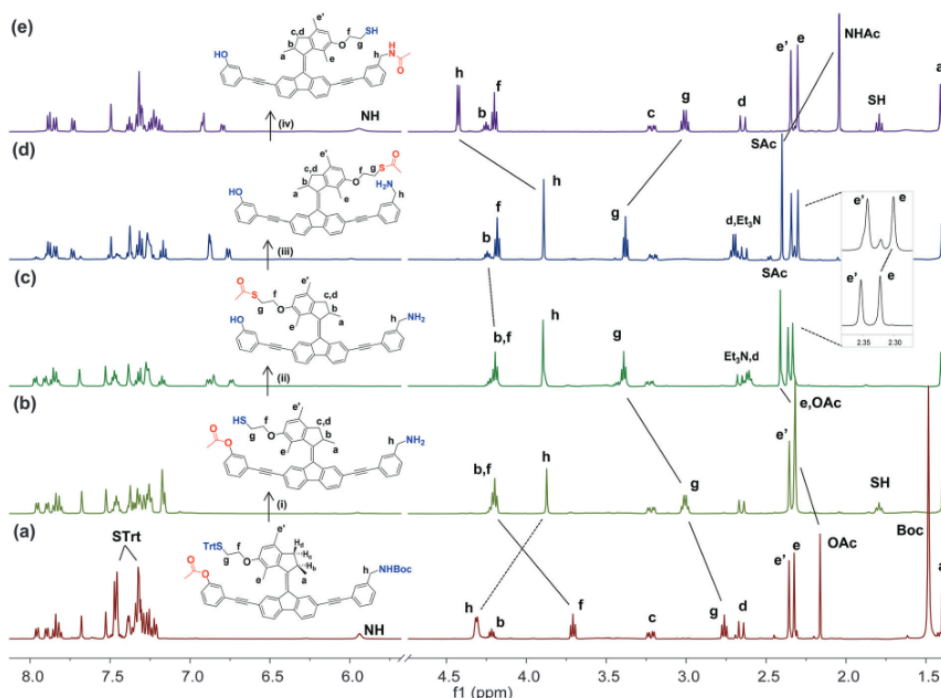
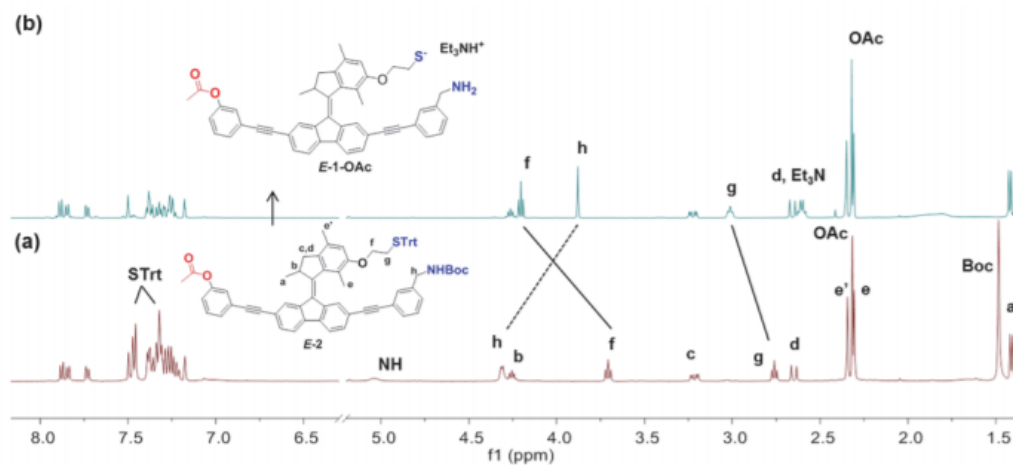


Fig. 3 Selected aromatic and aliphatic region in the ¹H NMR spectra of (a) **Z-2**, (b) **Z-1-OAc**, (c) **Z-1-SAc**, (d) **E-1-SAc**, and (e) **E-1-NHAc** in CD₂Cl₂. Reaction conditions: (i) CF₃COOH (2 equiv.), 0 °C, 5 min, filtration over Celite; (ii) Et₃N (1.5 equiv.), 40 °C, 2 h; (iii) hν (λ = 312 nm), -50 °C, 3 h, rt, 0.5 h; (iv) 40 °C, 1 h, filtration over silica. The inset shows the shift of H_c from **Z-1-SAc** to **E-1-SAc**.

また、コントロール実験によって分子内反応を起こさない位置にチオール、アミンが配置された分子で分子間反応が起こらないことが示されています。

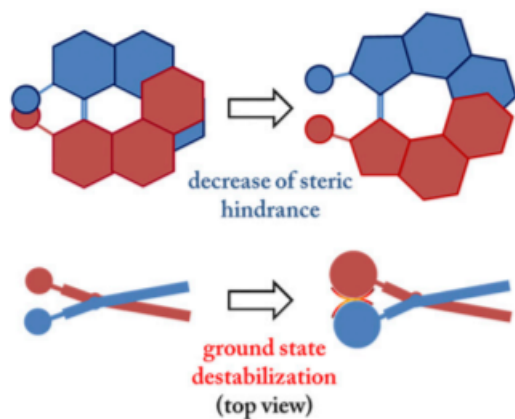


(i) CF₃COOH (2 equiv.), 0 °C, 5 min; (ii) Et₃N (1.5 equiv.), 40 °C, 2 h.

Figure S4. Partial ¹H NMR spectra (500 MHz, CD₂Cl₂) of (a) **E-2**; (b) **E-1-OAc**, after 40 °C for 2 h.

2. 第二世代型モーターに硫黄原子を挿入すると回転速度が上がるのはなぜか。

第二世代型について書かれているものは見つけることが出来ませんでした。第一世代型で 6 員環を 5 員環に変更すると回転速度が上がる理由を記述しているものはありました。(Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 2018, 115, 9423.) 6 員環を 5 員環にすることで、回転による立体障害が減少するため熱力学的な回転過程のエネルギーが低下します。また、新規分子モーターの設計には DFT 計算による回転障壁エネルギーの予測を行っているそうです。



3. ナノカーはどのようにして電気によって動くのか。

アゾベンゼンの 2 重結合が電気化学的に還元されてラジカルアニオンになり、シス・トランス異性化を行う報告があり(*J. Phys. Chem.* 1977, 81, 2288.)、さらにこの異性化を STM チップ上で行っている報告があります(*J. Phys. Chem.* 2008, 112, 10509.)。これらの報告を元に分子モーターに応用したと記述されていました。