

## ニトロヒドロキシベンゼン誘導体を導入したV型分子の合成と単結晶X線構造解析

(昭和薬大薬<sup>1</sup>・徳島文理大香川薬<sup>2</sup>) ○川幡 正俊<sup>1</sup>・富永 昌英<sup>2</sup>・山口 健太郎<sup>2</sup>  
 Preparation and SCD analysis of V-shaped molecules bearing nitrohydroxybenzene derivatives  
 (<sup>1</sup>Showa Pharmaceutical University, <sup>2</sup>Faculty of Pharmaceutical Sciences at Kagawa Campus,  
 Tokushima Bunri University) ○ Masatoshi Kawahata,<sup>1</sup> Masahide Tominaga,<sup>2</sup> Kentaro Yamaguchi,<sup>2</sup>

We have synthesized V-shaped molecules of various disubstituted adamantane derivatives into which functional groups have been introduced, and reported their structural analysis. We will present the crystal structures of V-shaped molecules bearing nitrohydroxybenzene derivatives(1-4). In the crystal structure of 1, The Hirshfeld surface analysis by using CrystalExplorer17.5 shows two types of intermolecular C-H...O interactions. Energy frameworks analysis shows dispersion energy between C2 position of adamantanes.

*Keywords* : Crystal Structure; Hirshfeld Surface Analysis; Energy Frameworks; Adamantane

これまで我々は官能基を導入した多様な二置換アダマンタン誘導体のV型分子を合成し、結晶の作製、およびその構造解析について報告してきた。本発表ではニトロヒドロキシベンゼン誘導体を導入したV型分子群 (1-4) の単結晶X線構造解析結果について Hirshfeld 表面解析も含めて発表する。1 では分子内に鏡面をもつ構造 ( $Z' = 0.5$ ) であるのに対し、他では1分子独立の構造であった。CrystalExplorer17.5 による1の Hirshfeld 表面解析では (1)ニトロ基とそのオルト位の水素、(2)ヒドロキシ基とそのオルト位の水素の分子間 C-H...O 相互作用が示唆され、Energy Frameworks 解析からはアダマンタンの2位の間を中心とした分散エネルギーが示唆された。

