

非環状ホスト分子によるゲスト包接結晶の多点分子間相互作用解析

(昭和薬科大¹・徳島文理大香川薬²) ○川幡 正俊¹・山本 陽香²・富永 昌英²・山口 健太郎²

Multiple Intermolecular Interaction Analysis of Guest Inclusion Crystals by Acyclic Host Molecules (¹Showa Pharmaceutical University, ²Faculty of Pharmaceutical Sciences at Kagawa Campus, Tokushima Bunri University) ○Masatoshi Kawahata,¹ Haruka Yamamoto,² Masahide Tominaga,² Kentaro Yamaguchi²

Disubstituted adamantanes having nitrophenol units was employed to examine the ability of molecular recognition for ketone and ester through multiple intermolecular interactions, and had plural donor and acceptor sites of hydrogen bonds. Crystallization of 1,3-bis(2-hydroxy-5-nitrophenyl)adamantane (**1**) afforded three inclusion crystals with acetone, 2-butanone, or methyl acetate at 1:1 stoichiometry. X-ray crystallographic analysis manifested that hydroxyl groups in **1** interact with the oxygen atoms of guests through OH \cdots O interactions for all crystals. The hydrogen atoms in guests participate in CH \cdots O interactions with nitro and hydroxyl groups at multiple points for each crystal. On the other hand, **1** and ethyl acetate did not afford any inclusion crystals.

Keywords : Inclusion Crystal; Intermolecular Interaction

ニトロフェノールユニットを有する二置換アダマンタンを用い、多点での分子間相互作用によるケトンおよびエステル分子の分子認識能を調べたところ、水素結合を含む複数の分子間相互作用が確認された。1,3-bis(2-hydroxy-5-nitrophenyl)adamantane (**1**)はアセトン、2-ブタノン、酢酸メチルとそれぞれ 1:1 の化学量論で包接結晶を与えた。単結晶 X 線結晶構造解析の結果、すべての結晶において、**1** の水酸基はゲストの酸素原子と OH \cdots O 相互作用をしていることが明らかになり、また、ゲストの水素原子は **1** のニトロ基やヒドロキシル基と多点で CH \cdots O 相互作用をしていることが確認された。一方、**1** と酢酸エチルでは包接結晶は得られなかった。

