

## MOF カラムクロマトグラフィーによる脂肪酸メチルエステルの高精度分離

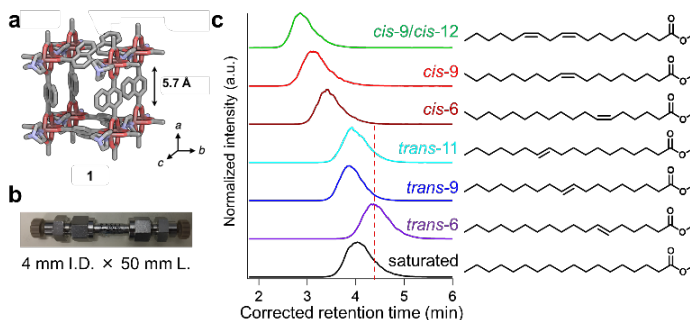
(東大院工<sup>1</sup>) ○鳥本 明大<sup>1</sup>・細野 暢彦<sup>1</sup>・植村 卓史<sup>1</sup>

High-Precision Separation of Fatty Acid Methyl Esters by MOF Column Chromatography  
(<sup>1</sup>*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*) ○Akihiro Torimoto,<sup>1</sup> Nobuhiko Hosono,<sup>1</sup> Takashi Uemura<sup>1</sup>

Purification of fatty acid methyl esters (FAMES) is necessary process in food sciences due to concern about health effect of *trans* isomers; however, effective separation based on precise structure recognition of FAMES has not been achieved by conventional techniques.<sup>1,2)</sup> In this study, we have developed a high-precision separation technique for FAMES using a metal-organic framework (MOF), [Zn<sub>2</sub>(1,4-ndc)<sub>2</sub>ted]<sub>n</sub> (**1**, channel aperture size = 5.7×5.7 Å<sup>2</sup>, ndc = naphthalenedicarboxylate, ted = triethylenediamine) (Figure 1a), as the stationary phase of HPLC. The **1**-packed column (Figure 1b) showed precise recognition of the number, *E/Z* isomerism, and the position of unsaturated bonds in FAMES, resulting in different retention time on the HPLC chromatograms (Figure 1c). Based on the comprehensive investigations including adsorption experiments, thermodynamic analyses, and molecular dynamics simulations, we propose a novel recognition mechanism in which structural commensuration between the periodic structure of MOF and the structure of FAME plays a predominant role.

**Keywords:** Metal-organic frameworks; Column chromatography; Fatty acid methyl esters

脂肪酸は食品業界において重要な化合物であり、トランス脂肪酸の健康への悪影響に対する懸念などから脂肪酸メチルエステル(FAME)の正確かつ効率的な分離技術の開発が望まれている。しかし、既存の結晶化法やクロマトグラフィー法などでは多種多様な FAME の僅かな構造の違いを識別し分離することは困難であった<sup>1,2)</sup>。本研究では、直径約 5.7 Å の 1 次元状細孔を有する 多孔性金属錯体(MOF): [Zn<sub>2</sub>(1,4-ndc)<sub>2</sub>(ted)]<sub>n</sub> (**1**) (Figure 1a)を充填したカラムを作成し、MOF HPLC による C18FAME 7 種類の *E/Z* 異性や位置異性を認識した分離を達成した。MOF は金属イオンと有機配位子から成る結晶性化合物である。MOF の細孔径および細孔壁(有機配位子)との相互作用の違いにより、FAME の構造が精密に認識された。吸着試験や熱力学的解析、分子動力学シミュレーションを用いた詳細な検討から、FAME の分子形状だけでなく、二重結合-カルボニル間距離までもが周期的に配列した有機配位子との相互作用によって認識され、特異な選択性に関与している可能性が示された。



**Fig 1.** **a** Crystal structure of **1**, **b** Photograph of **1**-packed column, **c** HPLC patterns of FAMES on **1**-packed column.

1) W. Tsuzuki, K. Ushida, *Lipids* **2009**, 44, 373–379.

2) K. Strohmeier, S. Schober, M. Mittelbach, *J. Am. Oil Chem. Soc.* **2014**, 91, 1217–1224.