

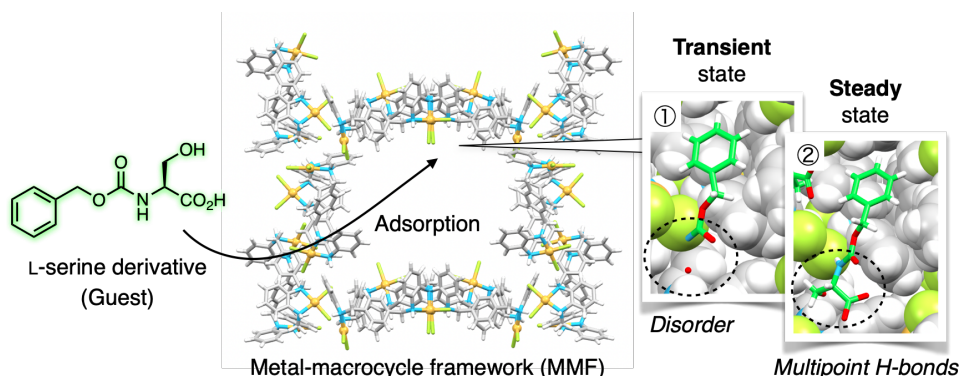
多孔性超分子結晶におけるアミノ酸誘導体吸着過程の X 線直接観察

(東大院理¹) ○宮部 浩人¹・林 龍之介¹・小林 醇也¹・田代 省平¹・塩谷 光彦¹
 Direct X-ray observation of adsorption process of amino acid derivatives in a supramolecular porous crystal (¹*Graduate School of Science, The University of Tokyo*) ○Hiroto Miyabe,¹ Ryunosuke Hayashi,¹ Junya Kobayashi,¹ Shohei Tashiro,¹ Mitsuhiro Shionoya¹

Revealing the recognition and adsorption processes of complex molecules with various functional groups is important for the design of dynamic supramolecular systems and for understanding the dynamic aspects of enzymatic reactions. We have previously reported single-crystal X-ray snapshot analysis of stepwise adsorption of a guest molecule to porous metal-macrocycle framework (MMF) constituted with trinuclear Pd^{II} macrocyclic complexes.^[1] In this study, observation of the adsorption process of an amino acid derivative, *N*-benzyloxycarbonyl-L-serine, was examined by the same method as the previous study. As a result, it was indicated that after the presence of a transient adsorbed structure with only benzyloxycarbonyl group adsorbed, a steady state with multipoint hydrogen bonding between the serine residue and MMF was shown to form. This stepwise adsorption process was also supported by molecular dynamics simulation.

Keywords : Porous crystal; X-ray diffraction; Pd complex; Amino acids; Adsorption

さまざまな官能基を持つ複雑な分子の認識・吸着過程を明らかにすることは、動的な超分子システムの設計や酵素反応の動的機構の理解に重要である。先に我々は、環状三核 Pd^{II} 錯体からなる多孔性結晶 metal-macrocycle framework (MMF)の細孔内認識サイトにおいて、ゲスト分子の段階的吸着過程が逐次的単結晶 X 線回折測定によって直接観察できることを報告している^[1]。本研究では、アミノ酸誘導体である *N*-(ベンジルオキシカルボニル)-L-セリンをゲスト分子として、MMF 細孔内での分子吸着過程を同手法によって観測した。その結果、セリン残基が多点水素結合を形成した定常状態に至る前に、ベンジルオキシカルボニル基のみが吸着した過渡的な吸着構造を経ることが示唆された。また、この段階的吸着過程は分子動力学計算からも支持された。



[1] R. Kubota, S. Tashiro, M. Shiro, M. Shionoya, *Nat. Chem.* **2014**, 6, 913.