

環状錯体集積型多孔性結晶におけるフラン誘導体の選択的分子認識

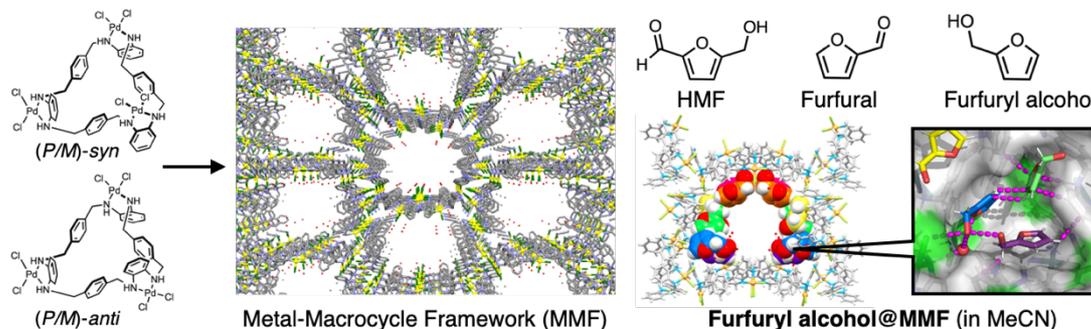
(東大院理¹)○桑原 恭兵¹・田代 省平¹・塩谷 光彦¹

Selective molecular recognition of furan derivatives by a porous metal-macrocycle framework (¹*Graduate School of Science, The University of Tokyo*) ○Kyohei Kuwabara,¹ Shohei Tashiro,¹ Mitsuhiro Shionoya¹

In biomass refinery, which aims to replace petroleum-derived chemicals with biomass-derived chemicals, the separation and chemical conversion of furan derivatives obtained from biomass is attracting attention. We have previously reported a porous metal-macrocycle framework (MMF) consisting of four isomeric Pd^{II}₃-macrocycles and its unique molecular recognition ability.^[1] In this study, the recognition of various furan derivatives in MMF was examined in order to comprehensively analyze the intermolecular interactions formed by furan derivatives as a basic knowledge for the separation and conversion of furan derivatives using porous materials. Single-crystal X-ray diffraction analysis of MMF crystals including 5-hydroxymethylfurfural (HMF), furfural, or furfuryl alcohol revealed that the polar side chains and the furan ring itself form multiple interactions with MMF, contributing to site-selective and substrate-specific molecular recognition.

Keywords: Porous crystal, Molecular recognition, Multinuclear Pd complex, Furan derivatives

石油化学製品をバイオマス由来化学製品に置き換えるバイオマスリファイナリーはますます重要になっており、バイオマスから得られるフラン誘導体の分離精製や化学変換は注目を集めている。先に我々は、環状パラジウム三核錯体の四種異性体からなる多孔性結晶 Metal-macrocycle framework (MMF) を開発し、ナノチャンネル表面に存在する異種複数の吸着サイトにおいて様々なゲストを分子認識できることを報告した^[1]。今回、多孔性材料を用いたフラン誘導体の分離・変換における基礎的知見を得るため、多孔性結晶 MMF に様々なフラン誘導体を選択的に吸着させることにより、フラン誘導体が形成する分子間相互作用を網羅的に解析することを目指した。5-ヒドロキシメチルフルフラール (HMF) やフルフラール、フルフリルアルコールなどをゲスト分子として包接した MMF の単結晶 X 線回折測定を行ったところ、側鎖の極性官能基やフラン環が細孔表面との多様な分子間相互作用を介して形成した、位置選択的および基質特異的な分子認識様式を明らかにすることができた。



[1] S. Tashiro, M. Shionoya, *Acc. Chem. Res.* **2020**, *53*, 632–643.