

ソフトな多孔性有機結晶による柔軟なゲスト化合物の吸着と構造解析

(徳島文理大香川薬) ○富永昌英・新川翔陽・兵頭 直・山口健太郎

Structural elucidation of guests with flexible conformations by soft porous organic crystals (Tokushima Bunri University) ○Masahide Tominaga, Shoyo Shinkawa, Tadashi Hyodo, Kentaro Yamaguchi

Structural determination of liquid organic compounds with a flexible conformation is an important subject. By using molecular crystals of an adamantane-bearing macrocycle possessing pyrazine parts, several ketones and esters were included in single-crystal to single-crystal guest exchanges, and their molecular structures were confirmed by X-ray analysis. Among them, included acetylacetone was an enol form, which interact with macrocycle through multiple intermolecular interactions. In refinement, the degree and number of constraints and restraints in the identified guests were less due to the optimization of structural changes in soft macrocycle-based frameworks to maximize the host-guest complexation.

Keywords : Macrocycle; Guest Exchange; Porosity; Phase Transition; Crystal Engineering

環状化合物からなる多孔質有機結晶は、ゲストの吸着・貯蔵、分離などの機能と関連して注目を集めている。多くのゲストはガスあるいは芳香族化合物であるのに対し、構造が柔軟な化合物は例が限定されている。本研究では、環状化合物からなるソフトな多孔性有機結晶を活用したゲスト化合物の吸着と構造解析を報告する。

アダマンタン、プロモベンゼン、ピラジンからなる環状化合物(**1**)のジクロロメタンを有する包接結晶を調整した(Fig. 1)。これを、アセチルアセトン中で1日室温で浸漬することにより吸着結晶を得た。X線構造解析の結果、環状化合物のコンフォメーションと充填構造は変化していることから、ゲスト交換により単結晶→単結晶構造変化することが分かった(Fig. 2)。アセチルアセトンは2分子包接されており、エノール型であることが明らかになった。同様に酢酸エチルのゲスト交換と構造解析に成功した。マロン酸ジメチルやピルビン酸エチルを用いた場合、環状化合物のコンフォメーションと充填構造は保持されており、ゲストは2分子包接されることが分かった。ゲスト分子のディスオーダーは抑制されており、柔軟な鎖状化合物の構造同定にはソフトな多孔質結晶が有用であることが示唆された。

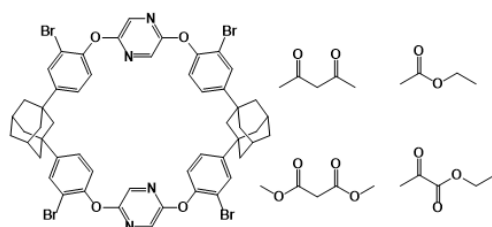


Fig. 1 Macrocycle (1) and four guests.

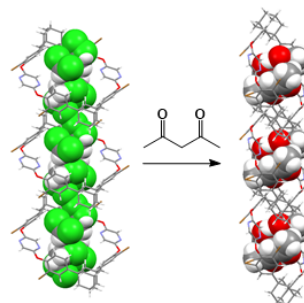


Fig. 2 Guest-induced structural change.