

ビスフェノール A 誘導体溶媒和結晶の X 線構造解析

(横浜国大院環境¹・三菱ケミカル²)¹・○藤野 瑞生¹・権谷 佐織¹・佐竹 賢一²・松本 真哉¹

The crystal structure of several solvates of two bisphenol A derivatives (¹*Graduate School of Environment and Information Science, Yokohama National University*, ²*Mitsubishi Chemical Corporation SIC*) ○Mizuki Fujino,¹ Saori Gontani,¹ Kenichi Satake², Shinya Matsumoto¹

Bisphenol A derivatives are raw materials for polymer resins that have potential applications in various fields. We have studied the crystal structures of several alcohol solvates of linear alkyl derivatives **1** shown in Fig. 1, and found that the solvent type does not affect the molecular arrangement of the derivatives, but only the crystal lattice. In the present study, the X-ray structures of four alcohol-solvated crystals of two derivatives **2** and **3** with 12-membered rings were analyzed, and the effects of solvent on their crystal structures were compared.

The alcohols used to prepare the solvated crystals were EtOH, 2-PrOH, *n*-BuOH, and *i*-BuOH. The crystal structures of all the solvated crystals were obtained. In the crystals, the solvents formed OH...O intermolecular hydrogen bonds with the bisphenol molecules. Comparison of the crystal structures showed that the *i*-BuOH crystal of **2** and the *n*-BuOH crystal of **3** were similar in molecular arrangement and intermolecular hydrogen bonding (Fig. 2). In the solvated crystal of **1**, the molecular arrangement of **1** was almost the same regardless of the type of alcohol. In the case of **2** and **3**, however, there found no structural similarity between each different solvated crystals.

Keywords : BPA; Functional molecule; X-ray structure analysis; Solvates

ビスフェノール A(BPA)誘導体は様々な分野で利用可能性のある高分子樹脂原料である。これまでに、Fig. 1 に示す直鎖アルキル誘導体(**1**)の幾つかのアルコール溶媒和晶において、溶媒の種類が **1** の分子配列には影響せず、結晶格子にのみに影響することを明らかにしたり。本研究では、12 員環を有する誘導体 **2** 及び **3** の 4 種のアルコール和晶の X 線構造解析を行い、これらの結晶構造における溶媒の影響について比較検討した。

溶媒和晶の作製に使用したアルコールは EtOH、2-PrOH、*n*-BuOH、*i*-BuOH であり、全ての溶媒和晶の結晶構造が得られた。溶媒は各結晶中でビスフェノールと OH...O 分子間水素結合をしていた。それぞれの結晶構造を比較すると、**2** の *i*-BuOH 晶と **3** の *n*-BuOH 晶は分子配列や分子間水素結合の様式が類似していた(Fig. 2)。**1** の溶媒和晶においては、アルコールの種類に関わらず **1** の分子配列はほぼ同一であったが、**2** と **3** の場合は、それぞれの異なる溶媒和晶間では構造に類似性は見られなかった。

1) 藤野瑞生, 権谷佐織, 中村健史, 松本真哉, 日本化学会第 100 春季年会予稿集 (2020)

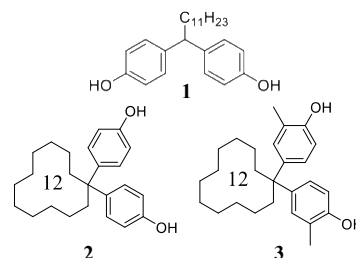


Fig. 1 BPA 誘導体の構造

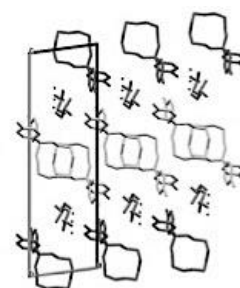


Fig. 2 **2** の *i*-BuOH 晶の結晶構造