

新規結晶スポンジを用いた求核性液体化合物の X 線構造解析

(花王株式会社¹・住友ファーマ株式会社²・キリンホールディングス株式会社³・塩野義製薬株式会社⁴・株式会社ダイセル⁵・日産化学株式会社⁶・株式会社三井化学分析センター⁷・メルク株式会社⁸・株式会社リガク⁹・東大院工¹⁰・分子研¹¹)

○大澤 一弘¹・小池 亮¹・李 鐘光²・池田 睦希²・谷口 慈将³・高田 雄介⁴・榎藤 圭祐⁵・永榮 慧⁶・那須 徳廣⁷・Carolina Von Essen⁸・菊池 貴⁹・佐藤 宗太^{10,11}

X-ray Structure Analysis of Nucleophilic Liquid Compounds by a New Crystalline Sponge

(¹Kao Corporation, ²Sumitomo Pharma Co., Ltd., ³Kirin Holdings Company, Limited, ⁴Shionogi & Co., Ltd., ⁵Daicel Corporation, ⁶Nissan Chemical Corporation, ⁷Mitsui Chemical Analysis & Consulting Service Inc., ⁸Merck KGaA, ⁹Rigaku Corporation, ¹⁰Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, ¹¹Institute for Molecular Science(IMS))

○Kazuhiro Osawa¹, Ryo koike¹, Shoukou Lee², Mutsuki Ikeda², Yoshimasa Taniguchi³, Yusuke Takata⁴, Keisuke Gondo⁵, Kei Nagae⁶, Norihiro Nasu⁷, Carolina Von Essen⁸, Takashi Kikuchi⁹, Sota Sato^{10,11}

The crystalline sponge (CS) method has been utilized for molecular structure analysis.¹⁾ However, the structure determination of nucleophilic compounds by this method has been restricted because they collapse the crystallinity of CS.²⁾ In this study, we mined MOFs with crystalline sponge functionality from the Cambridge Structural Database, and confirmed that even the structure of liquid nucleophilic compounds which would collapse the conventional crystalline sponge can be determined. In addition, these MOFs can also be stored for a long time in polar solvents, making it possible to apply them to compounds that are only soluble in highly polar solvents. These new CSs would be expected to expand the polar range of compounds to which the CS method can be applied.

Keywords : Crystalline Sponge, MOF, X-ray diffraction, Structure Analysis

結晶スポンジ法¹⁾は、分子構造解析法として活用されている。しかし、結晶スポンジに対して求核性のある化合物をこの手法に適用すると、結晶スポンジの結晶性が崩れてしまうため、それらの化合物の適用には制約があった²⁾。本研究では、ケンブリッジ結晶構造データベースの中から、結晶スポンジ機能を持つ MOF を複数見出し、従来の結晶スポンジでは崩壊してしまう常温で液体の求核性化合物に対して、構造決定することに成功した。さらに、これらの MOF は極性溶媒中でも長期保存可能であり、高極性溶媒にしか溶けない化合物への適用が可能であった。本発見により、結晶スポンジ法を適用できる化合物の極性範囲が大きく広がることが期待される。

1) X-ray analysis on the nanogram to microgram scale using porous complexes, Y. Inokuma et al., *Nature* **2013**, 495, 461.

2) X-ray structure analysis of N-containing nucleophilic compounds by the crystalline sponge method, F. Sakurai et al., *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 15035