

サリドマイドのエナンチオマー結晶およびラセミ結晶における温度による構造変化の比較

(早大院先進理工¹・早大総研機構²・科学大理³・東大工⁴・名工大工⁵) ○松本 綾香¹・中川 鉄馬²・中西 卓也²・関根 あき子³・古城 綜佑³・吉良 美月¹・佐藤 宗太⁴・柴田 哲男⁵・朝日 透^{1,2}

Comparison of temperature-dependent structural changes in enantiomeric and racemic crystals of thalidomide (¹*Graduate School of Advanced Science and Engineering, Waseda University*, ²*Comprehensive Research Organization, Waseda University*, ³*School of Science, Institute of Science Tokyo*, ⁴*School of Engineering, The University of Tokyo*, ⁵*Department of Engineering, Nagoya Institute of Technology*) ○Ayaka Matsumoto,¹ Kenta Nakagawa,² Takuya Nakanishi,² Akiko Sekine,³ Sosuke Kojo,³ Mizuki Kira,¹ Sota Sato,⁴ Norio Shibata,⁵ Toru Asahi^{1,2}

Single crystals of thalidomide ($C_{13}H_{10}N_2O_4$, TD) were grown by the solvent evaporation method, and the temperature dependence of crystal structure, coefficient of linear thermal expansion of each crystal axis, and coefficient of volume thermal expansion of the unit cell were investigated over a wide temperature range. Comparing the temperature dependence of the crystallographic parameters of racemic TD crystals composed of symmetric heterochiral dimers (pairs of molecules with opposite chirality) and enantiomeric TD crystals composed of asymmetric homochiral dimers (pairs of molecules with the same chirality but two non-identical conformations) showed a clear difference between them. It is suggested that this difference is due to the different conformational changes of each monomer with temperature for symmetric and asymmetric dimers.

Keywords : Thalidomide; X-ray diffraction; Homochiral dimer; Heterochiral dimer

サリドマイド($C_{13}H_{10}N_2O_4$, TD)のエナンチオマー結晶およびラセミ結晶それぞれの単結晶を溶媒蒸発法により育成し、それらの結晶構造、各結晶軸方向の線熱膨張係数、および単位格子の体積熱膨張係数の温度依存性を幅広い温度範囲で評価するとともに、各結晶中の TD 分子における立体配座の温度変化を解析した。対称でヘテロキラルな二量体 (反対のキラリティを持ち立体配座が鏡像関係である二分子が水素結合した会合体) からなるラセミ結晶と、非対称でホモキラルな二量体 (同じキラリティを持つが立体配座が異なる二分子が水素結合した会合体) からなるエナンチオマー結晶では、結晶構造パラメータの温度依存性に明確な違いが観測された。また、対称な二量体と非対称な二量体では温度変化に伴う TD 分子の立体配座変化が異なり、その違いが熱膨張係数の温度依存性の違いに反映されることが示唆された。

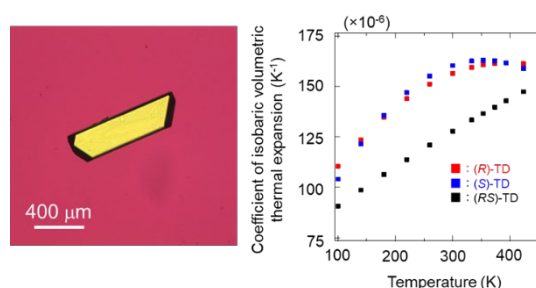


図 溶媒蒸発法で育成したラセミ体 TD 単結晶の偏光顕微鏡像 (左) と各 TD 単結晶の等圧体積熱膨張係数の温度依存性 (右)