

## キラルなマレイミド-フラン付加体が形成する固溶体の熱分析と結晶構造解析

(阪大基礎工<sup>1</sup>・阪大院基礎工<sup>2</sup>) ○小林嶺<sup>1</sup>・桶谷龍成<sup>2</sup>・久木一朗<sup>2</sup>

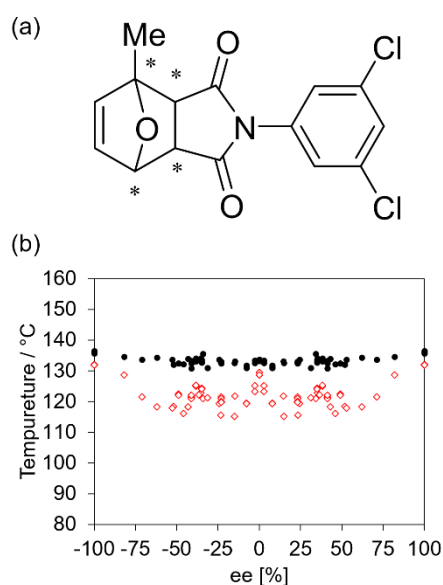
Thermal analysis and crystal structure analysis of solid solution formed by chiral maleimide-furan adduct (<sup>1</sup>*School of Engineering Science, Osaka University*, <sup>2</sup>*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*) ○Rei Kobayashi,<sup>1</sup> Ryusei Oketani,<sup>2</sup> Ichiro Hisaki<sup>2</sup>

Crystallization-induced deracemization has attracted attention as a resolution method of extracting enantiopure crystals from racemate by converting an enantiomer to the other enantiomer. Although the conditions under which it can be applied are understood, the driving force to convert a suspension consisting of a racemic mixture to enantiopure is unclear. We hypothesized that the driving force is a change to a thermodynamic equilibrium state. We focused on a partial solid solution, in which the composition of the crystalline phase is expected to converge to the solid solubility limit. Herein, we synthesized the chiral maleimide-furan adduct **1**, which has been reported that the deracemization converged to 49%*ee*<sup>1</sup>, constructed a melting point phase diagram, and analyzed the crystal structures at various compositions. We will discuss details of crystal structures and solid state landscape based on the phase diagram.

**Keywords** : Chirality; Deracemization; Solid Solution

結晶化によるデラセミ化は、キラル化合物のラセミ体を純粋なエナンチオマーに変換しつつ、結晶として取り出す手法であり、効率的な光学分割法として注目されている。適用できる条件は理解されているものの、キラリティ増幅の駆動力は理解されていない。すなわち、ラセミ体懸濁液がキラルな懸濁液へと変換される駆動力は明らかでない。本研究では、この駆動力が熱力学的平衡状態への変化であると仮説を立て、固溶体を形成する系に注目した。部分固溶体を形成する系が熱力学的に安定な相へと変換されるのであれば、結晶相の組成は固溶限界に収束すると予想される。本研究では、デラセミ化が49%*ee*で収束することが報告されているキラルなマレイミド-フラン付加体 **1** に注目し<sup>1</sup>、融点相図の構築とさまざまな組成における結晶構造解析を行った (Figure 1)。融点相図は **1** が40%*ee*付近に共晶様となる2種類の固溶体を与えることを示唆している。本発表では構造解析の詳細と合わせて報告する。

(1) Uemura, N.; Toyoda, S.; Shimizu, W.; Yoshida, Y.; Mino, T.; Sakamoto, *Symmetry* **2020**, *12*, 910.



**Figure 1.** (a) Chiral maleimide-furan adduct **1**. (b) Binary phase diagram for various composition. Red rectangles indicate the onset temperatures for the first peak, black circles indicate the peak temperatures for the second peak.