

トリス(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼン誘導体の分子結晶中に現れる潜在的な空孔を利用した選択的分子吸着

(¹広島大 WPI-SKCM²・²広島大院先進理工・³広島大自然セ) ○小野 雄大¹・平尾 岳大²・河田 尚美³・灰野 岳晴^{1,2}

Selective Molecular Adsorption Using Latent Porosity in a Molecular Crystal of Tris(phenylisoxazolyl)benzene Derivatives (¹*International Institute for Sustainability with Knotted Chiral Meta Matter/WPI-SKCM², Hiroshima University*, ²*Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University*, ³*Natural Science Center for Basic Research and Development/N-BARD, Hiroshima University*) ○Yudai Ono,¹ Takehiro Hirao,² Naomi Kawata,³ Takeharu Haino^{1,2}

Porous organic compounds have great potential for the adsorption and separation of molecular mixtures. Our group has reported flat molecule tris(phenylisoxazolyl)benzene formed self-assembled structure via intermolecular interactions in organic solvents.¹ In this study, we designed and synthesized tris(phenylisoxazolyl)benzene derivative **1** possessing methoxy group. The latent pores were found in the molecular crystal of **1**, which can be used for *cis*-selective molecular adsorption against the *cis*-/*trans*-decalin mixture (Figure 1).²

Keywords : Organic Crystal; X-Ray Diffraction Analysis; Porosity; Adsorption

空間・空隙を有する有機結晶は、その空間を利用した選択的な分子吸着や分離への応用が期待され、これまで盛んに研究が行われてきた。当研究室では、平面分子トリス(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼンが分子間相互作用を駆動力として溶液中で自己集合することにより形成される超分子ポリマーについて報告している¹。本研究では、側鎖にメトキシ基を導入することで結晶性を向上させたトリス(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼン **1** を設計・合成し、その分子結晶中に選択的分子吸着に利用可能な潜在的な空孔が存在することを見出した (Figure 1a)²。**1** は結晶中で積層構造を形成しており、その積層構造間には溶媒分子を包接可能な空間が存在していた (Figure 1b)。さらに、シス-トランスデカリン混合物を用いた吸着実験では、**1** の結晶中に存在する包接空間がシスデカリンを高選択的に吸着できることが明らかになった (Figure 1c)。

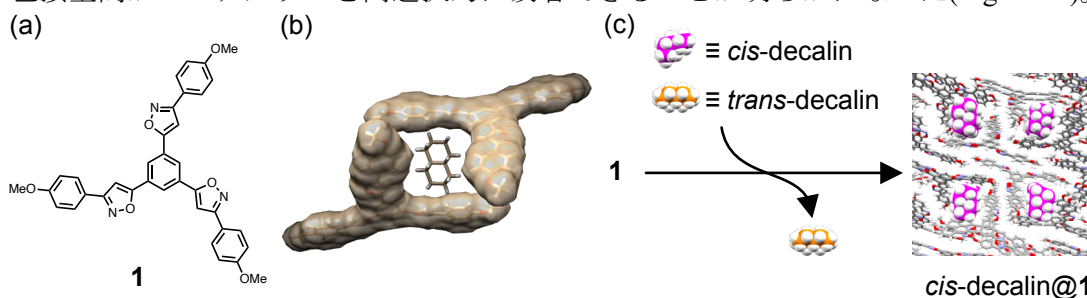


Figure 1. (a) Molecular structure of **1**. (b) Molecular surface of *cis*-decalin@**1**. (c) Schematic representation of *cis*-selective adsorption of **1** against the *cis*-/*trans*-decalin mixture.

1) M. Tanaka, T. Ikeda, J. Mack, Y. Kobayashi, T. Haino, *J. Org. Chem.*, **2011**, 76, 5082-5091.

2) Y. Ono, T. Hirao, N. Kawata, T. Haino, *Nat. Commun.*, **2024**, 15, 8314.