

フローインライン分析を活用した自動滴定による超分子相互作用の定量

(北大院理¹) ○富手 響介¹・宮岸 拓路¹・永木 愛一郎¹

Automated Flow Inline Titration System for the Evaluation of Supramolecular Interactions
(¹*Department of Chemistry, Faculty of Science, Hokkaido University*) ○Kyosuke Tomite¹,
Hiromichi V. Miyagishi¹, Aiichiro Nagaki¹

The evaluation of intermolecular interactions is essential for supramolecular chemistry. Typically, binding constants are determined through titration experiments using NMR or UV-Vis spectroscopy, and thermodynamic parameters such as enthalpy and entropy are evaluated through variable temperature measurements. The selection of an appropriate binding model requires a sufficient amount of titration data. However, conventional titration experiments often face challenges in providing detailed insights into the binding model due to limited data. In this study, we developed an automated system for titration experiments with multiple degrees of freedom, utilizing a flow-in-line analysis method. This system enables faster and more efficient evaluation of intermolecular interactions with reduced manual labor.

Keywords : *host-guest chemistry, flow reactor, automation, titration*

超分子化学において、分子間相互作用の定量は必要不可欠な技術である。分子間相互作用を表す会合定数は一般に NMR や UV-Vis を用いた滴定実験により計測され、温度可変測定と併用することで結合エンタルピー、エントロピーなどの熱力学的に重要な情報を得ることが可能となる。このような会合定数の決定においては、十分なデータ数を用意することで適切なモデルを選定することが必要となる。しかしながら、従来の滴定実験手法では溶液調製を人力で行うためスループットに限界があり、限られたデータ量での議論になる場面が多く存在する。本研究では、フローインライン分析により滴定実験を自動化することで、多自由度の滴定実験を高速化・省力化することに成功した。

