

結晶スポンジ法による含ケイ素環状化合物の分子構造解析

○嵩原 綱吉

大阪大学 産業科学研究所 技術室

1.はじめに

結晶スポンジ法¹は、藤田誠教授らにより 2013 年に開発された、単結晶化が困難な分子でも構造解析を可能にする新しい X 線結晶構造解析手法である。本発表では、常温で液体状であるため従来の X 線構造解析では不可能であった含ケイ素環状化合物の構造決定を行った事例を紹介する。

2.実験方法

Fujita (Hoshino *et al.*, 2016, Sakurai *et al.*, 2017)の手順に従い、ホストとして $[(ZnI_2)_3-(tpt)_2 \cdot x(Guest)]_n$ または $[(ZnCl_2)_3-(tpt)_2 \cdot x(Guest)]_n$ 多孔性錯体[tpt = 2,4,6-トリス(4-ピリジル)-1,3,5-トリアジン]を合成し、ゲスト化合物の包接を行った。ゲストとして、含ケイ素環状化合物^{2,3}を用いた(図 1)。ゲスト包接の後、単結晶 X 線構造解析装置(Cu K α)で回折データ測定を行い、SHELX を用いて結晶構造を精密化した。

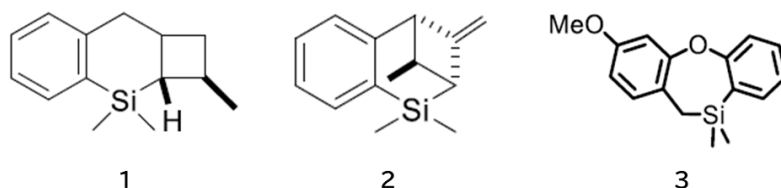


図 1 ゲスト化合物として用いた含ケイ素環状化合物

3.結果

いずれの化合物も結晶スポンジ中に取り込まれて周期的に配列しており、分子構造を決定することができた。図 2 に例としてゲスト化合物 1 の解析結果を示す。

4.おわりに

他の化合物の解析結果や、解析の過程で直面した問題点(主にディスオーダー)については、当日に詳細を発表する予定である。

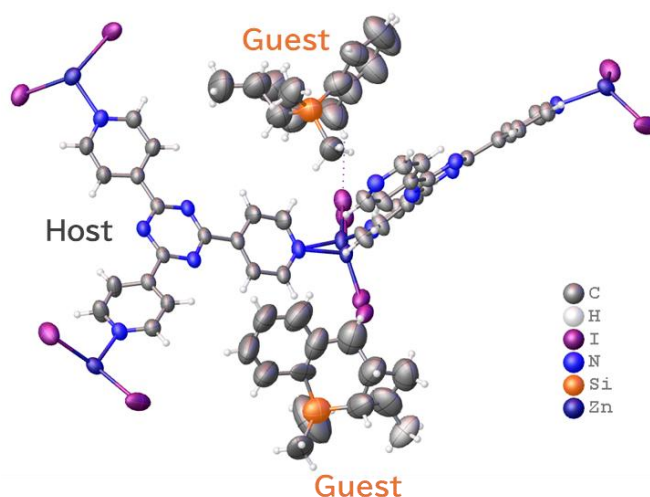


図 2 ゲスト化合物 1 を含む構造モデル(非対称単位)

参考文献

- [1] Y. Inokuma *et al.*, *Nature* 495, 461-466 (2013).
 [2] S. Yoshioka *et al.*, *Eur. J.* 2023, 29, e202203556.
 [3] K. Watanabe *et al.*, *Adv. Synth. Catal.* 2025, 367, e202401125.