

2023 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

## 研究成果報告書

(1) 事業名 (下記より該当事業名を選択し、ほかは削除して下さい。)

MicroED

(2) 研究代表者

氏名：佐々木 俊之

所属機関名・部局名・職名：高輝度光科学研究センター(JASRI)・放射光利用研究基盤センター 回折・散乱推進室・テニユアトラック研究員

(3) 研究課題名 (申請時に記載したものと同一課題名を記入して下さい。)

クネーフェナーゲル縮合生成物の結晶構造解析とわずかな構造変化が凝集誘起発光特性にもたらす影響の解明

(4) 蛋白質研究所受入担当教員

教員名： 栗栖 源嗣 (研究室名：蛋白質結晶学 )

(5) 研究成果の概要 (公開)

\*背景および目的、方法と結果、について、公開して差し支えない範囲で 1 ページ以内で記載。

### 【背景と目的】

我々はクネーフェナーゲル縮合により一連の D- $\pi$ -A 型化合物を合成し、それらが置換基の位置や種類に応じて発光強度の増減や、青色から黄色まで幅広い波長範囲での発光色変化を示すことを見出した。特に注目すべき点として、これらの化合物群は溶液状態では弱い発光であるのに対し、凝集することで発光強度が増大する凝集誘起発光を示す。本研究では、MicroED による結晶構造解析によって構造と上記のような特徴的な発光特性との相関解明を目的としている。

### 【方法と結果】

再結晶により単結晶 X 線回折に適したサイズの結晶が得られた場合には、市販の X 線回折装置や放射光施設 SPring-8 にて測定し、結晶構造解析を行った。一方で、極微小結晶の集合である粉末状のサンプルしか得られない化合物に関しては MicroED 測定を行い、複数の結晶について構造解析に成功した。その結果、目的物のほかに原料や合成の中間体、さらには結晶多形が存在することが明らかとなった。特に原料の結晶については、思いがけず以前の報告例とは異なる新規の多形構造の解析に成功している。これまでに解析済みの結晶構造と今回 MicroED により解析に成功した結晶構造を比較したところ、分子の平面性や集積様式の違いが明らかとなった。それらの違いが発光特性の違いをもたらしていると考えられるが、現在、その影響に関して分子軌道計算の結果も考慮しながら機構解明を進めている。