

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：石割文崇

所属機関名・部局名・職名：大阪大学大学院 工学研究科 応用化学専攻 講師

(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。)

自発的対称性破れを伴う不斉結晶化を示す有機化合物の統計的結晶化挙動解析

(4) 蛋白質研究所受入担当教員

教員名：栗栖源嗣 教授、中根崇智 准教授、川本晃大 助教 (研究室名：蛋白質結晶学研究室)

(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。

対称性破れを伴う不斉結晶化とは、アキラルな化合物が不斉結晶化する際に、どちらか片方の立体を有する結晶が偏って得られるという興味深い現象である。最近我々は、アントラセン環を有する種々の 1,5-ジアザシクロオクタン(DACO)誘導体の合成を検討している過程で、偶然にもそのうちの一つの誘導体が対称性の破れを伴う不斉結晶化挙動を示すことを見出した。本研究では当初、microED が、多数の結晶を高速で解析可能かつ、最近の電子線回折解析技術により不斉の判別も可能であることに着目し、多数の結晶の microED 測定による不斉判別で、対称性の破れを伴う不斉結晶化の不斉収率を統計的に決定することを目的にしていた。しかしながら、研究開始直後のミーティングにより、microED では不斉の判別は、ハイスループットに行うことは現状困難であるということになり、メインターゲットを変更することにした。その後、研究代表者の所属するグループで合成した、いくつかの有機および無機化合物の microED 解析に挑戦し、そのいくつかで結晶構造解析に成功した。研究代表者が合成中間体として合成していたトルキセンという化合物は、1889 年に合成された非常に歴史のあるラダー型の有機化合物であるが、単結晶性の固体は得られるものの解析が困難な場合が多く、2023 年当時も 100 年以上に渡り、単結晶構造は報告されていなかった。トルキセンの微粉末の microED 測定を行うと、良好な回折を示し、その結晶構造解析に成功した。そのほかにも、結晶の極性に関連する第二高調波発生の調査結果を含めた論文を現在作成中であり、2024 年度の学会でも発表予定である。今後も、類似の結晶構造未知化合物の結晶構造解析に関する研究を microED の共同利用にて行う予定である。