（様式 1-1）　　提出日：2025 年　5 月　12 日

2024 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、ほかは削除してください。）

MicroED

（2）研究代表者

氏名：西内　智彦
所属機関名・部局名・職名：大阪大学・大学院理学研究科化学専攻・准教授

（3）研究課題名（申請時に記載したものと同じ課題名を記入してください。）

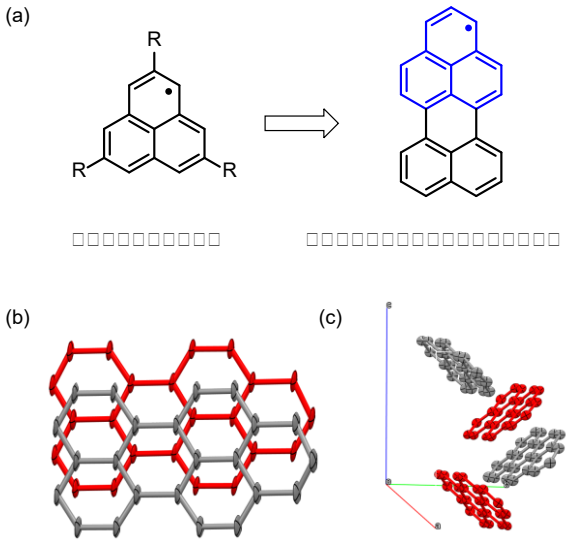
π共役系炭化水素の極微小結晶の構造解析

（4）蛋白質研究所受入担当教員

教員名：中根崇智　　（研究室名：　栗栖研究室　　）

（5）研究成果の概要

＊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記載。

π共役系炭化水素の分子構造の解析はその物性を詳細に理解する上で欠かすことが出来ない。特にその分子構造を明確に評価する X 線結晶構造解析は非常に重要なツールである。しかし X 線結晶構造解析を行うには非常に小さな結晶も存在し、物性を理解する上で重要な分子構造を明らかにできていない分子も存在する。本研究では、我々がこれまでに合成してきたπ共役系炭化水素化合物の中で X 線結晶構造解析を行うには難しい極微小結晶の構造を明らかにするため、MicroED 構造解析の共同利用研究を行ってきた。

今年度は、右図 a に示すフェナレニルラジカルをナフタレンで拡張した化合物(NaP)の解析を行った。一般的にラジカル種は空気や水に対して高い反応性を示す。フェナレニルラジカルは不対電子がπ平面状を非局在化するため比較的安定なラジカルであるが、安定に取り扱うためには R の置換基としてメチル基以上の嵩高さを必要とする。一方で今回合成した NaP は、不対電子がより広いπ平面状を非局在化できるため熱力学的安定性が向上し、置換基を必要としない。MicroED 構造解析の結果、NaP は結晶中でスリップスタック型の二量体を形成し（右図 b）、それがヘリングボーン型に CH-π相互作用していることが分かった（右図 c）。