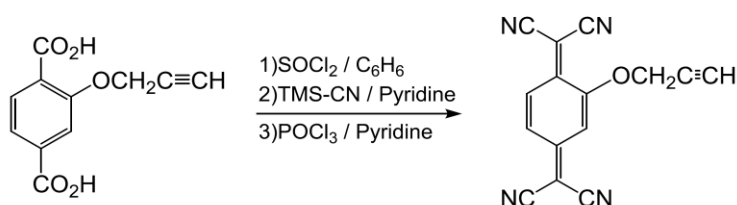


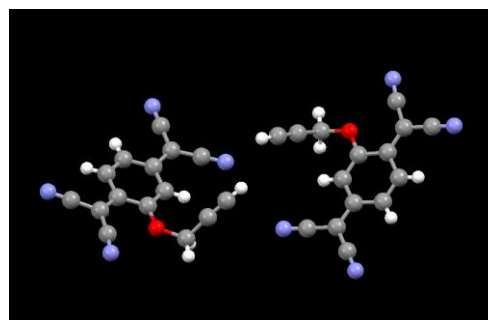
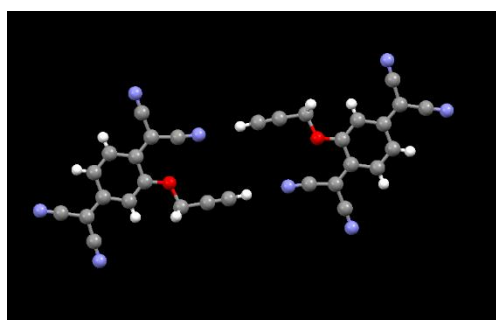
技術紹介 「アセチレン部位をもつTCNQ誘導体の合成と量子化学計算による多形生成の解析」

システム工学部 化学メジャー 奥野 恒久 准教授

ジアセチレン化合物にするための前駆体ですが、TCNQ骨格にアセチレン結合を導入した化合物を合成しました。TCNQ骨格はレドックス特性に優れますので、アセチレン化合物として重合反応を試みるのも面白いと思います。メルマガをお読みの方の中でご興味をお持ちの方がいらしたら、ご連絡ください。



この化合物では、分子の配座が異なる多形が得られてきました。これまで不安定と考えられる多形の生成に対して、データを元に解釈することは出来ませんでした。そこで我々は相互作用する数分子に対して再結晶溶媒の影響も加味して計算機実験を行うことにしました。単分子の段階ではゴーシュ体(右)が安定であり、2分子で計算を行っても依然としてゴーシュ体が安定でした。そこでアンチ体(左)が得られた溶媒の効果を計算に取り入れた結果、安定性が逆転し、多形が生成することを矛盾なく説明することができました。



この研究で用いられた、多分子での計算・溶媒効果の導入といった方法論は、有機固体、特に医薬品およびその中間体を生産する際に生成してくる多形問題の発生機構に対して一つのアプローチを示したもので、多様な局面への適用が可能であると考えています。この研究内容は以下の論文誌において公開予定となっています。

参考文献 : Y. Iida, M. Kataoka, T. Okuno, "Conformational polymorphs of a novel TCNQ derivative carrying an acetylene group", Journal of Molecular Structure, 1152C (2018) pp. 261-265. DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.09.075