

## 多孔性複合体を用いたナノ-マイクログラムスケールでの X 線解析

杉野 公美

天然物分野においても合成化学分野においても、得られた化合物の正確な構造解析が求められる。日常的に用いられる質量分析、NMR スペクトル解析は迅速な構造決定のツールであるが、そこから得られる構造はあくまでも推定の域を出ない。もっとも正確な手段は ”構造が目に見える” X 線結晶構造解析だが、化合物の結晶化は困難であることが多くサンプルの調製に ”技” が必要とされる。そして、そもそも結晶化能の無い化合物には適用できない。今回、筆者らは多孔性複体の結晶スポンジを用いることで、揮発性の高い非結晶化合物の X 線構造解析や、ナノグラムスケールでの X 線構造解析に成功している。今後の発展によっては様々な大きさの分子、タンパク質への応用が期待でき、化合物の構造解析において革新的な技術が報告されたと言える。

### 紹介論文

X-ray analysis on the nanogram to microgram scale using porous complexes

Inokuma Y., Yoshioka S., Ariyoshi J., Arai T., Hirota Y., Takada K., Matsunaga S., Rissanen K., and Fujita M. (The University of Tokyo)

Nature, 495, 461-466 (2013)

### 要旨

X 線単結晶構造回折 (SCD) 解析はターゲット化合物の単結晶を準備しなければならないという制限がある。今回、筆者らはサンプルの結晶化を必要としない SCD 解析のプロトコルを報告している。その方法では、化合物を取り込むように、多孔性コンプレックスの小さな結晶がターゲット化合物の溶液中へ沈められる。多孔性コンプレックスの骨格を基に結晶構造解析することで、取り込まれた化合物の構造を決定できる。SCD 解析がコンプレックスのうちのたった一つの小さな結晶上で行なわれるため、必要とされるサンプル量はナノグラムからマイクログラムオーダーである。筆者らは最低 80 ナノグラムのサンプルがあれば SCD 解析には十分であることを明らかにした。HPLC と組み合わせることで多くのフラクションの直接的な解析が可能となり、液体クロマトグラフィー-SCD 解析のプロトタイプとしての方法論を確立した。さらに、筆者らはわずか 5 ミリグラムの化合物を用いて微量海洋天然物の構造を決定した。