

AI 活用で挑む学問の革新と創成  
2022 年度採択研究代表者

2022 年度  
年次報告書

桶谷 龍成

大阪大学 大学院基礎工学研究科  
助教

深層学習を利用した分子性結晶のキラリティ判別

## 研究成果の概要(800文字以内)

2022年度はキラルな外形をもつ結晶を与える化合物として、ヒドロベンズイン、アスパラギン、 $\gamma$ -グルン酸ラク톤の結晶化とその外形観察、分析方法の検討を行った。結晶化では、いずれの化合物も溶液を一定温度で静置する手法を行ったものの、結晶の大きさにばらつきが大きく安定して観察に最適な結晶を得ることができなかった。そこで、溶液を室温下、攪拌し続けることで結晶化を行った。この手法によりサイズが均一な結晶を得ることができた。しかしながら結晶の大きさが 10  $\mu\text{m}$  程度の結晶となり非常に小さく、顕微鏡下を用いても人間の目で右型と左型を判別するには時間がかかる作業となってしまった。ラベリング作業に適さない顕微鏡写真となってしまったため、結晶の調製条件の検討を再度進めている。一方で、結晶中の鏡像異性体過剰率の分析方法はいずれも HPLC を用いた分析条件を決定した。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Single Crystalline, Non-stoichiometric Cocrystals of Hydrogen-Bonded Organic Frameworks, Taito Hashimoto, Ryusei Oketani, Masaki Nobuoka, Shu Seki, and Ichiro Hisaki, *Angew. Chem.Int. Ed.* **2023**, 62, e20221583.
- 2) Use of Conglomerate Mixed Crystals to Deracemize a Stable Racemic-Compound-Forming System, Clément Pinètre, François-Xavier Gendron, Reiko Kuroda, Ryusei Oketani, Dr. Christian Aupetit, Thierry Buffeteau, Gérard Coquerel, *Chem. Eur. J.* **2023**, 29, e2023004