

ニッケル(II) および コバルト(II) 2,6-ナフタレン-ジカルボン酸塩 4 水和物の結晶構造

BP ChemicalsとSearleの研究者たちは、2,6-ナフタレンジカルボン酸のニッケル(II) および コバルト(II) 塩4 水和物の結晶構造を理解するために、計算機化学の手法を用いました。この化合物は、2,6-ナフタレンジカルボン酸ジメチル(NDC)の生産における副生成物であり、高機能ポリエステルへとつながる新しい化学中間体です。

これらの固体の性質を理解することは、それらの形成の要因を決定する助けとなり、ひいてはプロセスの向上をもたらします。

2,6-ナフタレンジカルボン酸ジメチル(NDC)は高機能ポリエステルにつながる重要な化学中間体です。例えば、NDCは加水分解を受け、液晶ポリエステルの用途においてテレフタル酸の更に高機能な代替品であるナフタレンジカルボン酸を生成します。ポリブチレンナフタレート（ポリブチレンテレフタレートに代わる単独重合体で、より一層の耐薬品性と耐熱性および高い抗張力を持つ）はNDCから生産することができます。

2,6-ジメチルナフタレン酸が触媒的均一酸化を受けてナフタレンジカルボン酸(NDA)を生成し、生成したNDAがさらにエステル化されて、工業用NDCが2,6-ジメチルナフタレン酸から生成されます。触媒のカルボン酸塩と還元金属がプロセスから回収されることもあります。これらのカルボン酸塩の結晶構造を理解することは、それらの形成、ひいてはその形成阻止についての洞察を与えることでしょう。

そのような理解を得るために、BP Chemicals のJames A. Kaduk とSearleのJason A. Hankoは計算機化学の技術を利用しました。彼らはまず、ニッケル(II) およびコバルト(II) 2,6-ナフタレンジカルボン酸塩 4 水和物の高品質な粉末サンプルを用意しました。粉末パターンは2種類の化合物が同等構造であることを明らかにしました。COMPASS力場を用いてNDA 2価アニオンの構造が構築され、構造最適化が行われました。このモデル構造はPowder Solve法（Reflex Plusで利用可能）を用いて導き出され、その後実験室レベルの粉末回折データに標準的なRietveld法を適用して精密化されました。CASTEPを用いた量子力学的構造最適化で、水分子の水素原子の位置を決定しました。水素結合は結晶構造において重要な特徴で、配位アニオンのコンフォメーションも決定します。

BP ChemicalsのResearch Associate ChemistであるDr. James Kadukは、「計算機化学は我々に二つの塩の結晶構造について様々な認識を与えてくれた。それは、構造に関する部分的な情報しか与えてくれない従来の手法では得ることが難しかっただろう。」と述べています。Kadukはさらに「結晶構造を知ることが、そのような物質がプロセス中でどのように形成されるのかを理解し、それらの形成をどのように阻止すべきかというアイデアを得る上で我々の参考になった。」と続けました。

Organization

BP Chemicals

Searle

Products

BIOVIA Materials Studio Reflex plus

BIOVIA Materials Studio Discover

BIOVIA Materials Studio COMPASS

BIOVIA Materials Studio CASTEP

参考文献

1. J. A. Kaduk and J. A. Hanko, 'Salts of Aromatic Carboxylates: The Crystal Structures of Nickel(II) and Cobalt(II) 2,6-Naphthalenedicarboxylate Tetrahydrate', *J. Appl. Crystallogr.*, 2001, 34, 720-714.