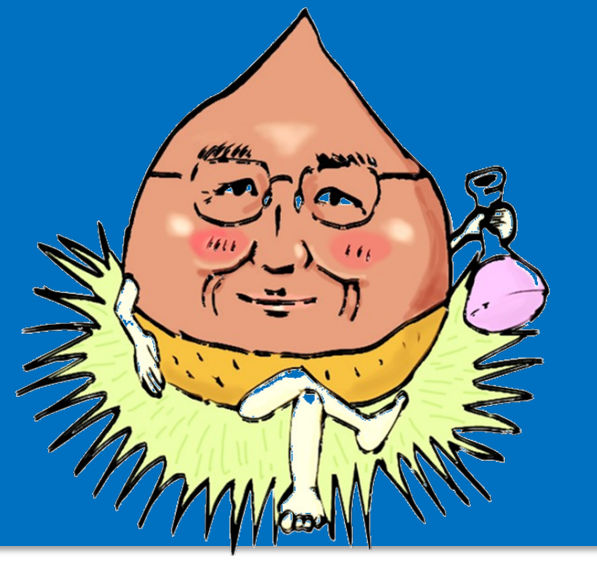


NMRによる立体異性体の構造解析

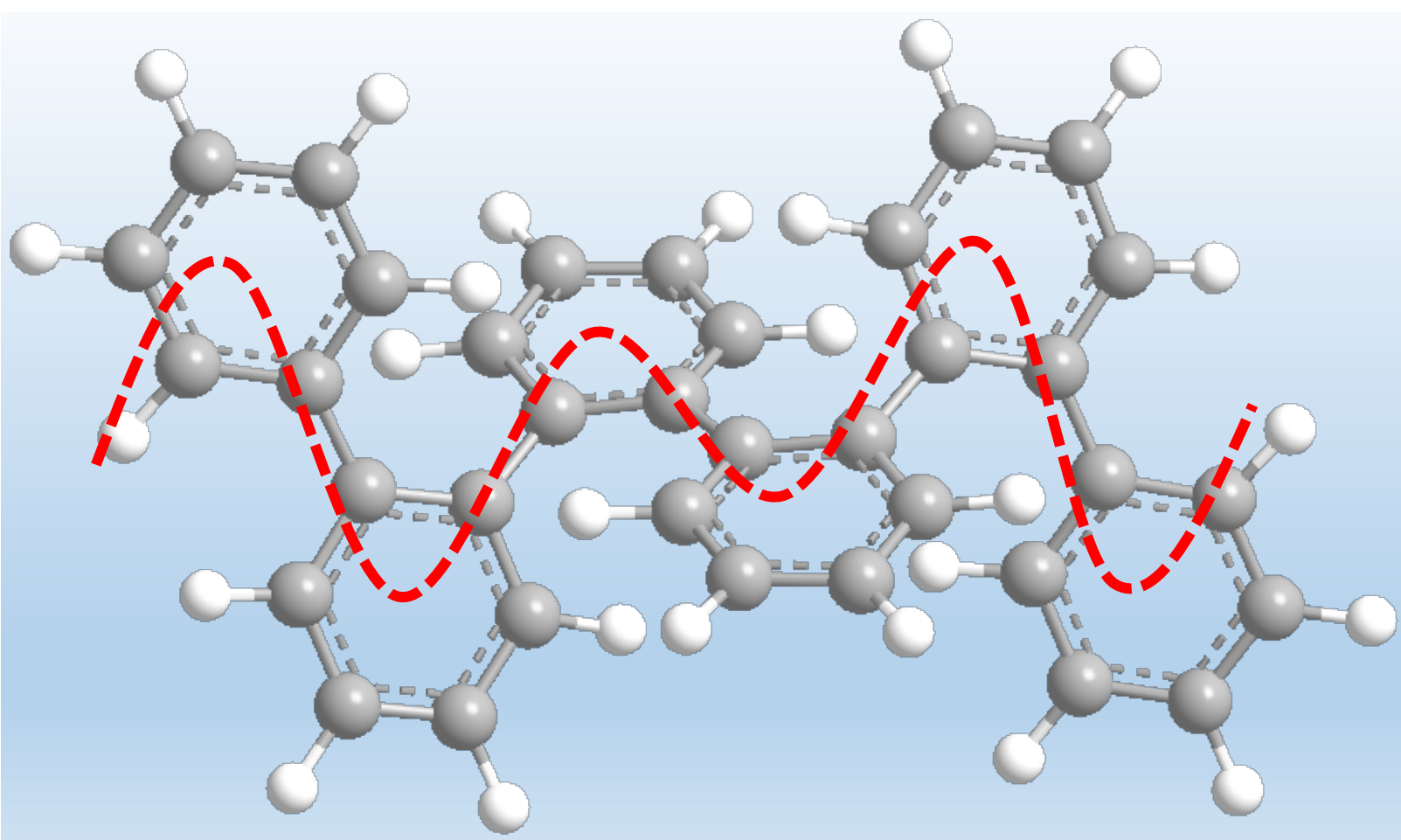


有機化合物は化合物の組成が同じでも、原子や原子団の立体配置が異なれば**立体異性体**となります。多くはキラル炭素の存在によって立体異性体となりますが、中には分子全体がらせん構造などを持つことで立体異性体となる場合があります。

分子構造解析では、原子もしくは原子団ごとの信号が区別して見える**核磁気共鳴分光法 (NMR)**が必須となります。しかし、1次元の ^1H NMRスペクトルで立体異性体を測定すると、区別して検出されてくるシグナルがあるため、解析が複雑、もしくは不可能になります。**2次元NMR**を用いれば、このような複雑な構造でも原子間の相関が見られ、信号と構造を正確に帰属することができるようになります。

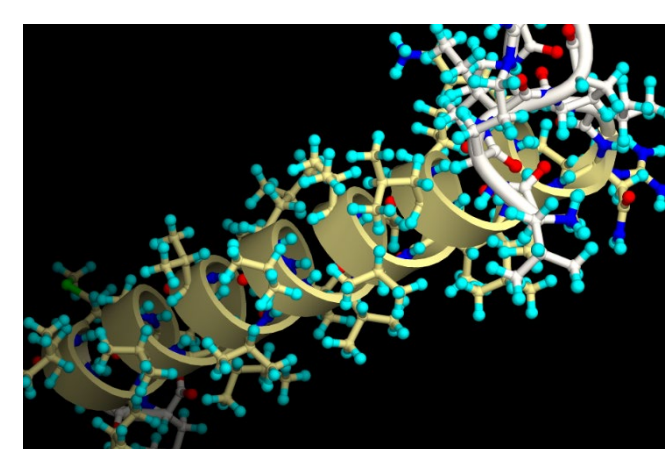
下図のスペクトルは、オルトフェニレン骨格を持つ化合物の例を示しました。構造の平面図を見ただけでは3次元的な構造が無いようにも見えますが、らせん構造によって複数の立体異性体があることが原因で、思わぬところに異なる信号がNMRで見えることがあります。2次元NMRの結合相関や距離相関などの多様な測定法を駆使することによって、立体異性体に惑わされず構造を調べることができました。

オルトフェニレン



オルトフェニレンは、「分子ばね」とも呼ばれ、図のように「らせん構造」とり、反転を繰り返します。そこに特定の官能基を導入することで右巻きと左巻きのどちらかに偏るといふ興味深い性質を持ちます。

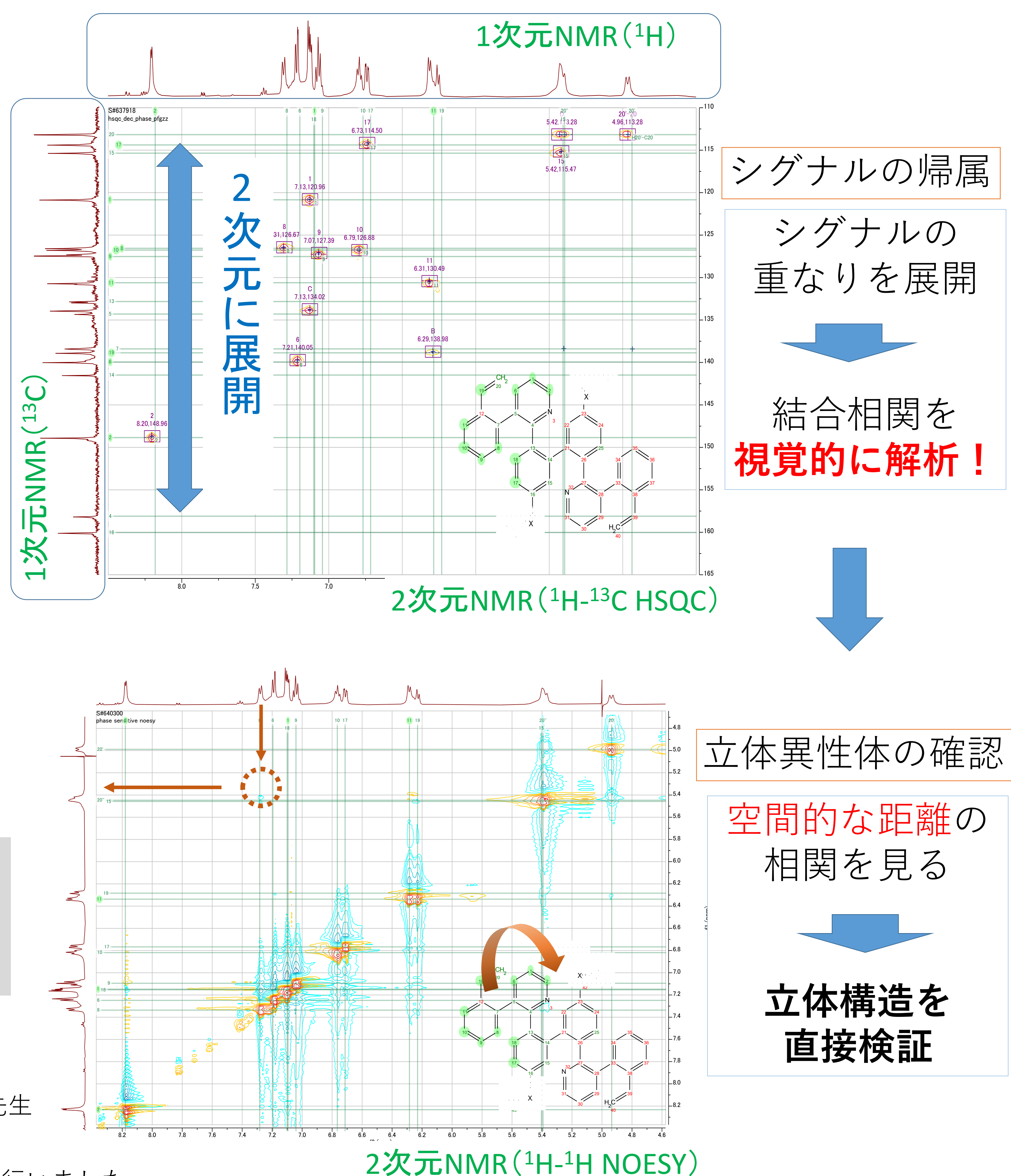
疑似タンパク質のような機能性高分子への期待



タンパク質のαヘリックスの例

* スペクトルは、Mestrelab社のMnovaで解析しました。スペクトルと分子構造の帰属ができるため、扱いやすいツールとなっています。これらは、本学の利用者もお使いいただけます。

* 本スペクトルは、大山俊幸先生（本学）および所雄一郎先生（防衛大学校）らのご研究の一環で測定したものです。機器分析評価センターでは、技術指導と解析のサポートを行いました。

2次元NMR（上が ^1H - ^{13}C 結合相関、下が距離相関）

連絡先: 機器分析評価センター

(HP) <https://www.iac.ynu.ac.jp/>

(電話) 045-339-4406 (E-mail) iac@ynu.ac.jp

