

## 岩下研究員が大学院学生や研究者向けの書籍「特論 NMR 立体化学」を上梓しました

(平成 24 年 7 月 10 日)

筆者（岩下）が生有研に入ったころ、NT-360 というプロトン共鳴周波数が 360 MHz の NMR 装置が分析室に設置され、複雑な有機化合物の構造決定に使われはじめた。学生の頃はもっぱら 60 MHz の NMR スペクトルしか見ていなかったもので、シグナルの重なりやすいメチレン領域のプロトンが分離して観測できる圧倒的な威力に驚かされたことを覚えている。当時、その高い分解能を活かして天然有機化合物の中でも最大級のパリトキシンの構造解析が行われた。当時はまだスピン-デカップリングが主な手段で、細かく照射位置を変えながらスペクトルの変化を見た。NT-360 は高い共鳴周波数を実現する超伝導磁石と当時としては強力なコンピューターを備えており、2次元 NMR という画期的な方法が使えるのが特徴だった。2次元 NMR はスピン-スピン結合や核オーバーハウザー効果といった様々な相互作用を利用してスピン間の相関を網羅的に見る方法であり、有機化合物の構造解析には欠かせない道具である。数年を経て、それまでに蓄積された 2次元 NMR スペクトルを使った有機化合物の解析法を解説した「チャートで見る超電導 FT-NMR」(英語版「One-dimensional and Two-dimensional NMR Spectra by Modern Pulse Techniques」) という本を上梓した。本の題名にある「超電導」は主に工学関係で使われる術語で「超伝導」という言葉が一般的になる前にそれと知らずに付けた書名だった。それから四半世紀以上の時が経ち、この間に研究所には NT-360 の後 AVANCE-750 ( $^1\text{H}$ : 750 MHz) や固体専用の NMR 装置が入り測定の対象も広がってきている。初期の超伝導 NMR 装置は多くのアナログ電子回路で構成され、フーリエ変換のために FID データだけがデジタル化されていたのが、今ではほとんど全てのシステムがデジタル化され PC からの指令を忠実に履行するように構成されている。また、この時期に分析用 NMR とは発想の異なる MRI という医療用イメージング装置の傾斜磁場という技術が発展したが、やがて分析用 NMR にも応用されるようになり、現在では炭素-13 などの他核も組み合わせた精緻な立体化学の議論が出来るようになっている。このような状況下、本書では有機化合物の立体化学の決定という観点に立って、基本的な解析法から JBCA 法、新 Mosher 法などを解説している。特に最終章で詳しく取り上げた新 Mosher 法は楠見-大谷らの開発した方法で、*S* 体および *R* 体の MTPA 試薬で水酸基の化学修飾を行い、詳細に周りのプロトン化学シフトを解析することにより絶対立体化学を決定する方法である。確度高く有機化合物の絶対立体化学を決定する方法としては非常にユニークで使い勝手が良いので、現在では定番の分析法となっている。

### 「特論 NMR 立体化学」

岩下孝／楠見武徳／村田道雄・著、発行 2012/07/10

ISBN978-4-06-154302-7、発行所 講談社

