

分子・物質合成領域における支援成果

920 MHz超高磁場NMR装置を用いた錯体による磁場配向の解明

^a東大院工・^b名市大院薬・^c理研・^d岡崎統合バイオ・^eCREST佐藤宗太^a, 諸原理^a・藤田大士^a・山口芳樹^{b,c}・加藤晃一^{b,d,e}・藤田誠^{a,e}

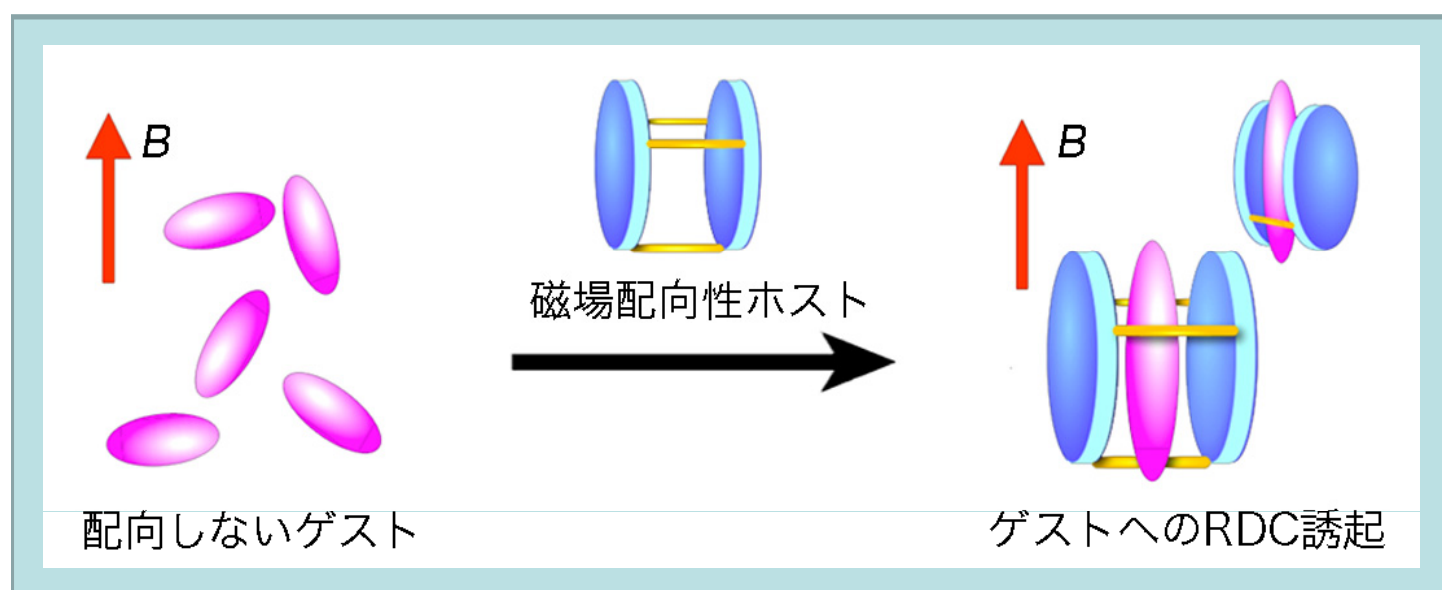
【研究目的】

残余双極子相互作用 (Residual Dipolar Coupling; RDC) は磁場により誘起された双極子相互作用であり、分子が溶液中で磁場配向する場合のみNMR測定において観測される。RDCの値は分子の3次元構造情報を含むため、液晶やバイセルなどの磁場配向材料を用いて生体分子に磁場配向を誘起する手法が多く研究されてきている。本研究では、構造を精密に制御した錯体をホスト分子として用い、磁場配向の制御をめざした。

【成 果】

分子が磁場配向しているか、磁場強度が異なるNMR装置で双極子相互作用を測定することで評価を行った。ラボの300~600 MHz装置に加えて920 MHz装置を併用することで、6.99~21.6 Tと幅広い測定データを得ることができ、明確な配向評価を行えた。

芳香属性分子は反磁性磁場配向することが知られている。本研究では、複数の芳香環が層状にスタックした錯体分子を使えば、個々の芳香環の加成效果によって大きな磁場配向が得られることを見だし、さらに、スタックする芳香環の数を変えることで、思い通りの大きさの磁場配向を実現できることを明らかにした。応用例として、中空の錯体分子をホスト分子として用い、磁場配向性を持たないゲスト分子を包接したところ、ホスト-ゲスト錯体として一体化して溶液中で振る舞うことでゲストも磁場配向し、ゲストのRDCを観測できることを見いだした。



本来は磁場に配向しないゲスト分子を、磁場に配向する性質をもつホスト分子に閉じ込めることで磁場配向させると、NMRを使ってゲスト分子のRDCを観測できることを明らかにした。