

らせん高分子の非共有結合性相互作用に基づいたキラルシフト試薬の開発  
 Development of Chiral Shift Reagent Based on Nonbonding Interaction of Helical Polymer

京都大学 工学研究科 合成・生物化学専攻 有機設計学講座 藤江 峻也

研究成果概要

我々はこれまでに、ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の主鎖らせん不斉制御について研究を行ってきた。(R)-2-オクタノール由来の側鎖を有するポリキノキサリン **P1** (Figure a) は純粋なシクロヘキサン中で右巻きらせん構造を形成することが知られている。また、最近シクロヘキサンに対してわずか 1mol% の 1,1,2-トリクロロエタン (1,1,2-TCE) の添加により主鎖らせん構造が左巻きへと反転することも見出している。このことから、**P1** と 1,1,2-TCE との間に特異的な相互作用が存在することが示唆された。また、NMR を用いた観測により、1,1,2-TCE の **P1** 存在下でのシグナルの分裂が観測された (Figure b)。

本研究では、スーパーコンピュータシステムの Gaussian16 をもちいて、どのように **P1** と 1,1,2-TCE が結合しているかを計算した。その結果、1,1,2-TCE が **P1** のユニット間の空隙に結合していることが明らかとなった (Figure c)。Q-chem をもちいたエネルギー分解解析によって、この結合には、分散力と静電力が同程度の寄与をしていることがわかった。今後は、キラルなゲスト化合物との相互作用についても検討を行う予定である。

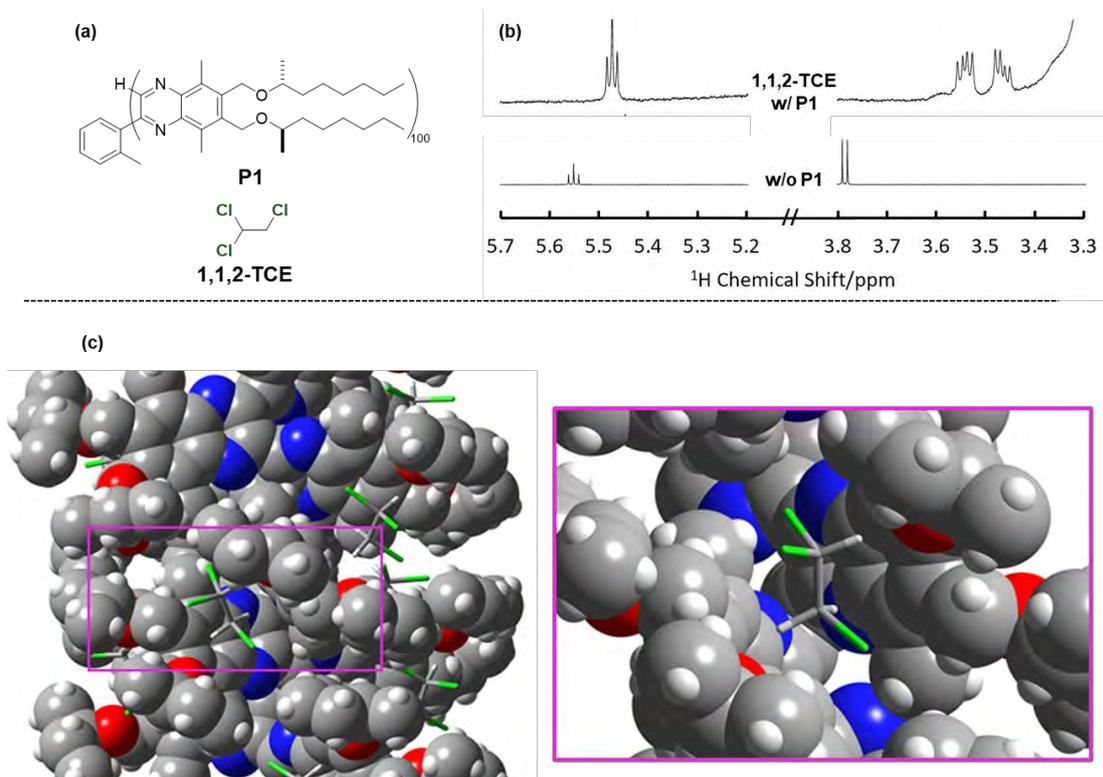


Figure. (a) Structure of **P1** and 1,1,2-TCE. (b) <sup>1</sup>H-NMR trace of 1,1,2-TCE with or without **P1** in cyclohexane-*d*<sub>12</sub>. (c) Calculated structure of **P1**/1,1,2-TCE complex.