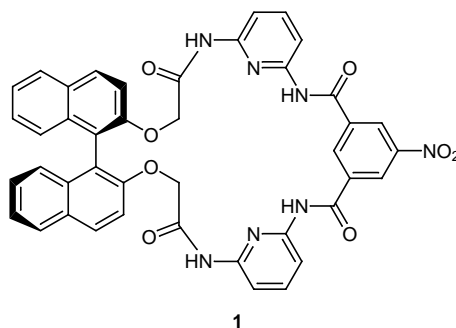


新しい光学純度決定試薬 / e.e. Determination of Wide Range of Chiral Compounds

C2184 Chirabite-AR [(*R*)-2,2'-[5-Nitroisophthalamidobis(2,6-pyridylene-carbamoylmethoxy)]-1,1'-binaphthyl] (1) 100mg 23,000円



キラバイト-AR(1)は依馬らにより開発された大環状化合物で、汎用性の高いキラルシフト試薬です。1の空孔は水素結合ドナー部位と水素結合アクセプター部位が巧みな組合せで配置されており、その空孔内に幅広い化合物をゲスト分子として取り込みます。そして、取り込まれたゲスト分子は、不斉源であるBINOLの強い磁気異方性効果を受け、エナンチオマー間でそのケミカルシフト値が大きく異なります。

Chart 1.

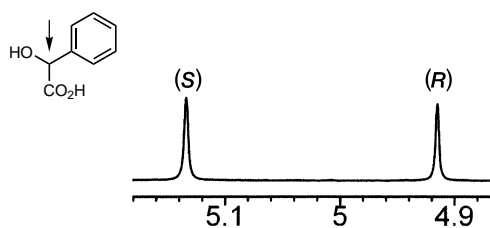
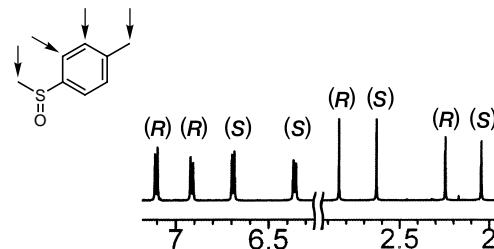


Chart 2.



Chirabite-AR (7 mg) in CDCl₃ at 22 °C

近年、高磁場NMRが普及しつつあり、従来から用いられているEu錯体ではブロードニングが生じ、満足に行くNMRスペクトルを得ることができません。1はブロードニングの原因となる金属を含んでいないため、高磁場NMR、低磁場NMRのいずれにも利用でき、カルボン酸、ラクトン、オキサゾリジノン、アルコール、スルホキシド、スルホキシイミン、イソシアナート、エポキシなどの幅広い化合物の光学純度が測定できます。また、その測定法は極めて簡便で、NMR試料管中の測定対象試料を溶解した重クロロホルムに1を添加するだけでエナンチオマー間のケミカルシフト値が異なるスペクトルを得ることができます。

1は利用しやすいこと、適応化合物が広範なこと、低磁場NMRから高磁場NMRまで利用できることなど、従来のキラルシフト試薬を凌駕する性能を有します。

文献 Versatile and practical chiral shift reagent with hydrogen-bond donor / acceptor sites in a macrocyclic cavity
T. Ema, D. Tanida, T. Sakai, *Org. Lett.*, **8**, 3773 (2006).